



סילבוס

תכנון וגילוי רציונלי של תרופות - 64200

תאריך עדכון אחרון 05-01-2014

נקודות זכות באוניברסיטה העברית: 2

היחידה האקדמית שאחראית על הקורס: רוקחות

השנה הראשונה בתואר בה ניתן ללמוד את הקורס: 1

סמסטר: סמסטר ב'

שפת ההוראה: עברית

קמפוס: הר הצופים

מורה אחראי על הקורס (רכז): מריה זצפין

דוא"ל של המורה האחראי על הקורס: maria.zatsepin@mail.huji.ac.il

שעות קבלה של רכז הקורס:

מורי הקורס:

פרופ עמירם גולדבלום

תאור כללי של הקורס:

מטרות הקורס:

תוצרי למידה

בסיומו של קורס זה, סטודנטים יהיו מסוגלים:

דרישות נוכחות (%) :

שיטת ההוראה בקורס: פרונטלית

רשימת נושאים / תכנית הלימודים בקורס:

א. מבוא לקורס: שיעור 1

- מבוא כללי: מהן תרופות, מהיכן מגיעות, תרופות וריפוי בעבר וכיום.
- מהו תכנון וגילוי רציונאלי, תרופות רציונאליות.
- שלבי פיתוח וגילוי תרופות בימינו, קשיים ואתגרים שבחיפוש ופיתוח.
- חיפוש תרופות ממוחשב ותוצאותיו
- שיטות לקבלת מידע קריסטלוגרפיה, ספריות ממוחשבות וסריקה שלהן.
- מקורות לתרופות, רפואה צמחית ותרופות "סבתא".
- תרופות בימינו, הדור החדש, הגישה המדעית.
- אישור תרופות של ימינו ו-FDA. התנגשויות בין תרופות, וסמים.
- פרמקולוגיה- פרמקודינאמיקה ופרמקוקינטיקה. ADME ורעילות.

ב. מבוא ביולוגי: שיעורים 2-4

- מסלולי תרופה בגוף: מטרות התרופות בגוף, מערכות כניסה, הובלה ופינוי.
- התא: ממבראנת התא, שומנים ורצפטורים.
- קישור תרופה לרצפטור: מנעול מפתח, יחסי גודל בין תרופה למטרה.
- אטום: טבלת היסודות. מבנה, מושגי יסוד, אלקטרונים פרוטונים ונויטרונים. אלקטרוני ערכיות, מסה, משקל מוקולרי, גודל, מטען.
- קשרים בין אטומים: קשר יוני, אלקטרו-שליליות ואלקטרו חיוביות של אטום, קשר קוולנטי-חיבור אלקטרוני ערכיות.
- אנרגיות: יחידות מידה, אנרגיה קינטית, אנרגיה פוטנציאלית ואנרגיית גרביטציה.
- מבנה מרחבי של מולקולות, דיפול במולקולה, מושג הווקטור.

ג. המים: שיעורים 5-6

- המים כמולקולת החיים.
- מבנה מולקולת המים, דיפול במולקולה, קוטב, חלוקת מטען בין האטומים.
- קשרי מימן: משיכה ודחייה בין מטענים נגדיים, סידור מרחבי מסודר ומצבי צבירה שונים של המים בתלות בקשרי המימן.

□ משמעות של קשרי המימן לחיים. המסה במים. מאפיינים והגדרות של הממס והמומס. התכונות: הידרופוביות הידרופיליות.

ד. חומצות ובסיסים וקבוצות מאפיינות: שיעורים 7-8

□ תפקיד הפרוטון בתהליכי חומצה ובסיס. מאפייניהם של חומצות ובסיסים. ה-pH. חומציות ובסיסיות של קבוצות כימיות שונות.

□ קבוצות כימיות מאפיינות חשובות: אמין, קרבוקסיל, הידרוקסיד, חומצה, טבעת ארומטית, וכו'.
□ קלסיפיקציה של מולקולות על פי תכונות כגון: גודל, מבנה תלת מימדי, אורך, מטען, הרכב יסודות אופייני וכו'. דוגמאות למולקולות ידועות.

ה. כימואינפורמטיקה ושיטות חישוביות: שיעורים 9-10

□ כימואינפורמטיקה: איסוף מידע על מולקולות, הפיכה של מבנים לנתונים מספריים. שימוש במחשב לבניית תיאוריה או מודל. תכונות אותן ניתן לכמת. בניית גרף של תלות בין מאפיין לתכונה ביולוגית או לבין פעילות. דוגמאות לבניית קשר כמותי בין תכונות.

□ חוקי ליפינסקי לזמינות ביולוגית: חשיבות החוקים ומטרתם.

□ טביעות אצבעות של מולקולות: סוגים (חד, דו ותלת-מימדיים) וצורת השימוש בהם בעת מחקר וחישובים של תכונות.

ו. חלבונים ודנ"א: שיעורים 11-12

□ דנ"א: מהו דנ"א, מבנה. נוקליאוטידים, סליל כפול, דחיסה של החומר התורשתי בתא, צופן גנטי. הקוד הגנטי, צורת קידוד של חלבונים.

□ חלבונים: מבנה, חומצות אמינו, קידוד על ידי דנ"א, מבנה ראשוני, שניוני, שלישוני ורבעוני. קיפול. תלות הפעילות במבנה. קריסטלוגרפיה ופענוח מבנה בעזרת רנטגן.

□ תכנון תרופות המבוסס מבנה. SBDD.

ז. עיגון כשיטה רציונאלית לחיפוש תרופות: שיעורים 13-14

□ אנרגיה בין מולקולות: אנרגיה בין קבוצות טעונות, קבוצות מאפיינות ואינטראקציות שהן יוצרות: מוסר ומקבל קשרי מימן, קבוצה ארומטית וקבוצה הידרופובית. קבוצות טעונות: אמינים וחומצות. אנרגיה כבסיס לתהליך העיגון.

האפקט ההידרופובי: משמעות וצפי להתנהגות של חומרים, האנתלפיה והאנטרופיה כמניעים להתרחשות של תגובות כימיות, ותגובת העיגון בפרט.

חומר חובה לקריאה:

חומר לקריאה נוספת:

הערכת הקורס - הרכב הציון הסופי :
מבחן מסכם בכתב/בחינה בעל פה 100 %
הרצאה 0 %
השתתפות 0 %
הגשת עבודה 0 %

הגשת תרגילים 0 %
הגשת דו"חות 0 %
פרויקט מחקר 0 %
בחנים 0 %
אחר 0 %

מידע נוסף / הערות: