



# Farmaceutska kemija 3

izr.prof.dr. Marko Anderluh

2. oktober 2012



# Kontakt

- [marko.anderluh@ffa.uni-lj.si](mailto:marko.anderluh@ffa.uni-lj.si)
- 01/47-69-639
- kabinet 240 (soba 254, podstrešje Stare tehnike)
- Govorilne ure: petek, 9.00-10.00



# FK3

- 3. Letnik:
  - 120 ur predavanj
  - 150 ur vaj
  - 30 ur seminarjev
- Vse skupaj – 20 KT



# Urnik

EMŠF3					
Ura	Datum	Prostor	Predmet	Vrsta	Skupina
Ponedeljek					
08:00-12:00	1.10 - 14.1	MF - PAFI	PAFI	P+S	EMŠF3
Torek					
07:30-09:00	2.10 - 15.1	P1 FFA-pritličje	FK III	predavanje	EMŠF3
10:00-11:30	2.10 - 15.1	Ilirija Velika predavalnica, Tržaška 40, Ljubljana	Farmakognozija I	predavanje	EMŠF3
Sreda					
08:00-10:00	3.10 - 16.1	Ilirija Velika predavalnica, Tržaška 40, Ljubljana	IFA	predavanje	EMŠF3
10:00-12:00	3.10 - 16.1	Ilirija Velika predavalnica, Tržaška 40, Ljubljana	Socialna farmacija	predavanje	EMŠF3
12:00-13:30	3.10 - 16.1	Ilirija Velika predavalnica, Tržaška 40, Ljubljana	Farmakognozija I	predavanje	EMŠF3
Četrtek					
08:00-11:00	4.10 - 17.1	P1 FFA-pritličje	FK III	P+S	EMŠF3
Petek					
08:00-10:00	5.10 - 18.1	MF - PAFI	PAFI	P+S	EMŠF3



# Urnik



EMŠF3	
Ura	Datum
Ponedeljek	
08:00-12:00	1.10 - 14.1
Torek	
08:00-09:30	2.10 - 15.1
10:00-11:30	2.10 - 15.1

Ljubljana

Vrsta	Skupina
P+S	EMŠF3

Sre

08:0

10:0

12:0

Čet

08:0

Pet

08:0



FA

ocialna farm

armakogno

K III

AFI





# Učitelji

- Prof. Dr. Stanislav Gobec





# Učitelji

- Doc. dr. Janez Ilaš





# Učitelji

- Doc. dr. Janez Mravljak







# Učitelji

- Doc. dr. Andrej Perdih





# Izpiti

- Pogoj – opravljen seminar
- Vaje – neobvezno, vendar pred vpisom v naslednje leto
- **FK3 je**





# Izpiti

- **FK3 je pogoj za vpis v 4. letnik**
- Pisni in ustni izpit
- $\geq 55\%$  prag za opravljanje ustnega izpita



# Izpiti

- Novembra/decembra 2012/2013
- Marca 2012/2013
- 2 roka junija/julija 2012
- 2 roka avgusta/septembra 2012

## Člen 14

V študijskem letu morajo biti pri vsakem predmetu objavljeni najmanj 4 izpitni roki, od katerih morajo biti pri predmetih, ki so pogoj za vpis v višji letnik, v spomladanskem in jesenskem izpitnem obdobju (t.j. junija in septembra) na razpolago skupaj najmanj 3 izpitni roki.

Ne glede na določilo prejšnjega odstavka so lahko pri predmetih, ki niso pogoj za vpis v višji letnik, izpitni roki porazdeljeni tudi drugače.



# Izpitni/študijski red

## 3. PREVERJANJE ZNANJA IN VEŠČIN

### Člen 7

Oblike preverjanja znanja so izpiti, kolokviji, seminarske naloge, prevodi strokovnih besedil, poročila o vajah, preverjanje veščin na vajah, poročila o strokovni praksi, diplomska dela in magistrska dela.

Oblike in način preverjanja znanja za posamezni predmet določa študijski program.

Z vsemi oblikami preverjanja znanja se preverja znanje snovi, ki jo določa študijski program.

Nosilec predmeta objavi na oglasni deski in spletni strani način preverjanja znanja in pogoje, ki jih mora kandidat izpolnjevati, do 15. oktobra, oz. za predmete, ki se izvajajo samo v poletnem semestru, najkasneje do 1. februarja. Datumi preverjanja znanja morajo biti objavljeni vsaj 2 meseca pred preverjanjem.



# Izpitni/študijski red

## Člen 8

Če je tako predpisano z učnim načrtom, se znanje pri posameznemu predmetu lahko preverja in ocenjuje tudi parcialno med študijskim letom. Ocene sprotnega preverjanja znanja ali bonitetne točke se upoštevajo pri končni oceni, tako kot je določeno v študijskem programu.

Pristop k posameznim oblikam preverjanja znanja je lahko pogojen s predhodno opravljenimi študijskimi obveznostmi, določenimi s študijskim programom, o čemer se učitelj oz. asistent prepriča iz podatkov študijske evidence.



# Izpitni/študijski red

## Prijava na izpit

### Člen 18

Študent se na izpit prijavi z oddajo prijavnice, preko spletne strani FFA v skladu z navodili. Šteje se, da se je študent prijavil pravočasno, če je prijavo oddal do objavljenega roka. Zadnji dan roka za prijavo je najmanj tri delovne dni pred datumom pričetka izpita.

Ce študent ugotovi, da ga ni na seznamu prijavljenih, mora sam preveriti, zakaj ni vključen v seznam. Če je izpuščen pomotoma, se ga naknadno vpiše na seznam za izpit, če pa ni oddal prijave na predpisan način ali pravočasno, izpita ne more opravljati. Učitelj sme sprejeti k izpitu samo študente, ki so se pravilno prijavili.

## Odstop od izpita

### Člen 20

Študent lahko odstopi od izpita v roku najkasneje 3 delovne dni pred datumom izpita. V kolikor se ne odjavi in nima izkazanih opravičljivih razlogov za izostanek, mu izpraševalec vpiše negativno oceno.



# Vaje

## Člen 6

Število skupin in razporeditev študentov znotraj skupin določi nosilec predmeta ali od njega pooblaščen vodja vaj. Menjave med skupinami so možne samo z njegovim soglasjem. Dopolnjevanje skupin s študenti nižjih letnikov (ponavljalci ali pavzerji) je možno samo v primeru prostih mest v skupini.





# Program predavanj

- Splošni del
- Posebni del



# Program predavanj

Teden	Σ ure	Datum 2011	Vsebine terminov in orientacijski čas	Izvajalec
1	0	2. 10. T	Uvod, učbeniki: Foye, Patrick, spletna stran FFA (ssFFA) Predavanja: interaktivni/klasični način in na tabli, Uvajanja: "problem based learning" pristopov, učenje (ppt oblika samo za podporo: sheme in slike) (pdf datoteka dostopna na ssFFA) izpiti: 6 rokov: pisni in ustni, predpogoj: vaje in seminar, 55% Definicije MC; zdravilo – učinkovina (cca 30 min); <u>Vaje: uvod v laboratorijsko in varno delo, kolokviji (60 min)</u>	MA  JM
	2	4. 10. Č	Viri učinkovin: naravni, nenaravni & Načini odkrivanja: izkušnje, slučajnost, načrtnost & Strategije: rešetanja, racionalno načrtovanja Zadetek in vodnica (praktični primer), Osnove racionalnega načrtovanja: shema faz procesa, optimiranje <i>In silico</i> metode, HTS (60 min) (Kombinatorične) kem. knjižnice: primerjava s klasično kemijo Razlaga dveh metod (40 min) (35 min)	MA
2	7	9. 10. T	Funkcionalne skupine pri učinkovinah in modifikacije Sprememba fizikalno-kemičnih lastnosti in strukturne karakteristike: Normalni in razvejani alkani/giblji vost Alkani/alkeni/alkini/cis-trans/togost, cikloalkani Aromati/heteroaromati/planarnost Heterociklične spojine Alkohol/eter/ester Kislina/ester/amid Amin/s. amin/t. amin/amonijeva skupina/amid Alifatski/aromatski halogeni, alkoholi, amini Alkohol/aldehid/kislina Polarizacija enojne/dvojne vezi Interakcije: Kovalentna: majhni obroči: aziridin, betalaktam, alkilhalogenidi, sulfonati, kislinski halogenidi (90 min)	MA
		11. 10. Č	Elektrostatske interakcije: Ionska vez.: energije, lastnosti, udeležene f. skupine Vodikova vez.: energija, razlaga vezi, lastnosti, f. skupine Voda (zelo skopo, slovenska monografija o vodi) Druge dipolarne interakcije Hidrofobne interakcije, nastanek, posledice, lastnosti VdW interakcije Kemično reaktivne skupine učinkovin, Okviri načrtovanja fiz-kem. lastnosti s kem. modifikacijo (135 min)	MA
3	12	16. 10. T	Radikali, verižne radikalske reakcije ROS, RNS. RSS in oksidativni stres, Antioksidanti (90 min)	JM
	15	18. 10. Č	SOD mimetiki Donorji NO kot vazodilatatorji in antiaritmiki Fotosenzibilizatorji kot učinkovine v fotodinamični terapiji singletni kisik (135 min)	JM



# Program predavanj

4	17	23. 10. T	Struktura: kislost/bazičnost učinkovin Kemična modifikacija in sprememba pK <sub>a</sub> , učinkovine pH, pK <sub>a</sub> , stopnja disociacije in transportne lastnosti (90 min)	MA
	20	25. 10. Č	Struktura: lipofilnost učinkovin, spreminjanje lipofilnosti Transport učinkovin kot f(logP) (45 min) vpliv na farmakokinetiko Računanje logP (90 min)	MA
5	22	30. 10. T	Računanje logP (seminar) (90 min)	MA
6	24	6. 11. T	Kiralnost in biološki učinek (90 min)	Jl
	27	8. 11. Č	Metabolizem učinkovin Metaboliti in farmakodinamika/farmakokinetika Metabolizem, radikali, elektrofilni, toksičnost, kancerogenost, teratogenost (135 min)	Jl
7	29	13. 11. T	Učinkovina in koncept predzdravila, Kemične modifikacije, farmakokinetika in ciljana dostava Lipinski, ADME (90 min)	MA
	32	15. 11. Č	Osnovni koncept izosterije in bioizosterija Praktična obravnava bioizosterije na konkretnih primerih (90 min) Koncept mimetika (45 min)	MA
8	34	20. 11. T	Mimetiki peptidov, saharidov, lipidov, NK itd (45 min) Posebej obravnava in primeri petidomimetičnih učinkovin (45 min)	MA
	37	22. 11. Č	Medmolekularno prepoznavanje, komplemetarne interakcije, komplementarne funkcionalne skupine Struktura, ki prepozna membrano, DNK, in receptorski vzorec Medmolekularno prepoznavanje in samozdruževanje/samourejanje, struktura membrane (135 min)	MA
9	39	27. 11. T	Farmacevtska kemija radioaktivnih učinkovin (90 min)	MA (PK)
	42	29. 11. Č	Encimi kot tarče, inhibicija v sklopljenem nizu encimskih reakcij Substrat –inhibitor, strukturne lastnosti inhibitorjev, Kompetitivni/reverzibilni/ireverzibilni inhibitorji Alosterični inhibitorji Samomorilski inhibitorji (135 min)	Jl
10	44	4. 12. T	Konkretni primeri delovanja izbranih inhibitorjev (90 min)	Jl
	47	6. 12. Č	Receptorji kot tarče učinkovin, prenos signala, Ionotropni in metabotropni receptorji, sekundarni prenašalci Receptorji za steroidne hormone Drugi receptorji in družine receptorjev (135 min)	MA
11	49	11. 12. T	Direktni/indirektni/delni agonisti, Ligand - antagonist, (90 min)	MA
	52	13. 12. Č	Tarče v sinapsi (20 min) Nukleinske kisline kot tarče (50 min) Membrana in druge tarče (40 min) Učinkovine na več tarč (25 min)	MA
12	54	18. 12. T	QSAR modeli in deskriptorji (pK, logP), Parabolični model, bilinearni model, Primer: sulfonamidi (pK <sub>a</sub> ) Primer: forbol diestri (logP), (90 min)	Jl
	57	20. 12. Č	Selektivna toksičnost, kemoterapija (20 min) SAR sulfonamidov SAR inhibitorjev giraze (70 min) Antibiotiki in rezistenca (45 min)	MA
13	60	3. 1. 2013 Č	6-APA in polsintezni penicilinski antibiotiki SAR in delovanje penicilinskih antibiotikov (90 min) Inhibitorji beta laktamaze (45 min)	MA



# Program predavanj

14	62	8. 1. 2013 T	7-ACA, SAR in delovanje cefalosporinov (90 min)	MA
	65	10. 1. 2013 Č	SAR in delovanje: tetraciklini Aminoglikozidi, makrolidi in drugi antibiotiki (90 min) Tarče protivirusnih učinkovin (45)	MA
15	67	15. 1. 2013 T	SAR in delovanje protivirusnih učinkovin (90 min)	MA
	70	17.1. 2013 Č	Vplivi na koncentracijo holesterola, SAR in delovanje zaviralcev sinteze holesterola (135 min)	MA



# Program predavanj

Teden	Ura	Datum	Tema	Izvajalec
16	72	19. 2. T	Molekularno modeliranje (135 min) Energija molekule: vezi, valenčnega kota torzijskega kota elektrostatke interakcije, VdW itd. Dinamika, minimizacija	AP (MA)
17	75	21. 2. Č	Molekularno modeliranje (Seminar) (90 min) Delo z ChemBioOffice Delo z ArgusLab	AP (MA)
18	77	26. 2. T	Rak (40 min) Tarče in strategije protitumorne terapije (50 min)	Jl
	80	28. 2. Č	Tarče in strategije protitumorne terapije Alkilirajoče učinkovine. SAR (135 min)	Jl
	82	5. 3. T	Protitumorni antibiotiki, interkalatorji (55 min) Razne protitumorne uč., SAR in delovanje (35 min)	Jl
19	85	7. 3. Č	Antagonisti hormonov kot protitumorne učinkovine (45 min) Enkefalinergični sistem, receptorji, endogeni opioidi (90 min)	MA
	87	12. 3. T	Agonisti in antagonisti na enkefalinskih receptorjih SAR in delovanje mimetikov enkefalina (90 min)	MA
18	90	14. 3. Č	Prostaglandini, Inhibicija : COX-1 in COX-2 Mimetiki arahidonske kisline in produktov (135 min)	MA
	92	19. 3. T	SAR in delovanje NSAID učinkovin (90 min)	MA
19	95	21. 3. Č	Biogeni amini Histamin, Receptorji, učinki SAR in delovanje H1 antagonistov SAR in delovanje H2 antagonistov (90 min)	SG
	97	26. 3. T	Holinergični sistem, Receptorji, učinki SAR in delovanje agonistov, antagonistov (90 min)	SG
20	100	28. 3. Č	AcChE: SAR in delovanje inhibitorjev ter reaktivatorjev, Centralni inhibitorji AcChE SAR spazmolitikov (135 min)	SG
	102	2. 4. T	Dopaminergični sistem, dopamin, receptorji, učinki SAR in delovanje agonistov in antagonistov (90 min)	MA
21	105	4. 4. Č	Nevroleptiki, Antiparkinsoniki (135 min)	MA
	107	9. 4. T	Adrenergični sistem, NA, receptorji in učinki SAR in delovanje agonistov (90 min)	MA
22	110	11. 4. Č	SAR in delovanje antagonistov Vazodilatatorji, bronhodilatatorji itd. (135 min)	MA
	112	16. 4. T	Serotoninski sistem, 5-HT, receptorji, učinki SAR in delovanje 5-HT agonistov, antagonsitov (90 min)	MA
	115	18. 4. Č	SAR in delovanje 5-HT agonistov, antagonsitov Antidepresivi (135 min)	MA
23	117	23. 4. T	Ekscitatorne aminokisline, učinkovine v glutaminergičnem sistemu (90 min)	MA
	120	25. 4. Č	GABA, Gabanergični sistem, receptorji SAR in delovanje agonistov in koagonistov GABA Anksiolitiki hinnotiki antikonzulzivi (135 min)	MA



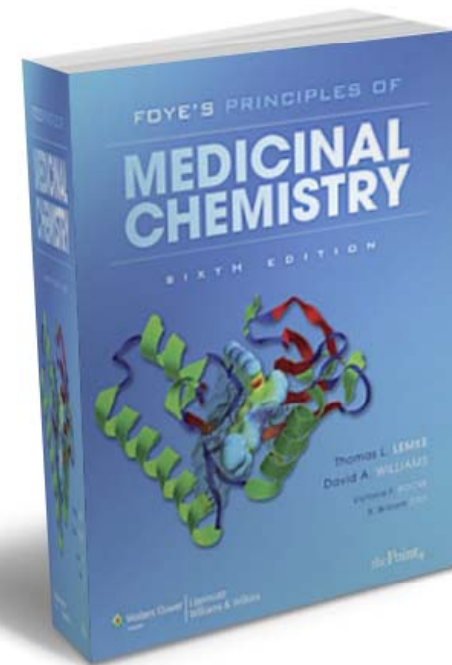
# Program predavanj

25	122	30. 4. T	Učinkovine z vplivi na transport kalcija, Antiarritmiki, hipotenzivi (90 min)	MA
26	124	7. 5. T	SAR delovanje učinkovin proti osteoporozi (90 min)	SG
	127	9. 5. Č	RAA sistem SAR in delovanje inhibitorjev ACE. (135 min)	
27	129	14. 5. T	SAR in delovanje antagonistov AT receptorjev (90 min )	MA
	132	16. 5. Č	Diabetes, SAR in delovanje antidiabetikov (135 min)	MA
28	134	21. 5. T	Steroidni hormoni, SAR estrogenov, progestinov, androgenov, (90 min)	SG
	137	23. 5. Č	Steroidni hormoni, mineralokortikoidi, glukokortikoidi (135 min)	SG
29	139	28. 5. T	Oralni kontraceptivi (90 min)	SG
	142	30. 5. Č	Oralni kontraceptivi – nadaljevanje, Primer razvoja steroidne učinkovine (135 min)	SG
30	144	4. 6. T	SAR in delovanje antikoagulantov (90 min)	JI
	147	6. 6. Č	Diureza, SAR činkovin, ki vplivajo na diurezo (135 min)	MA



# Strokovna literatura 1

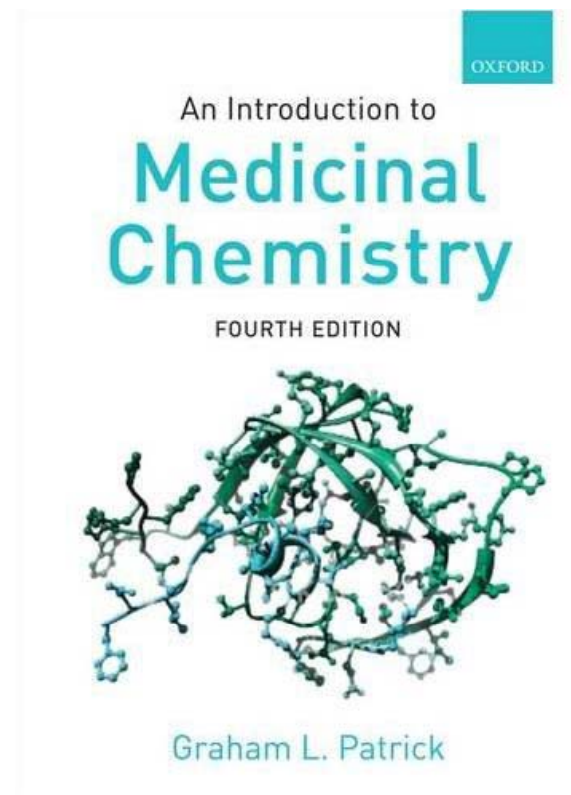
- T. L. Lemke, D. A. Williams: FOYE'S PRINCIPLES OF MEDICINAL CHEMISTRY
- 6th Edition, 2008





# Strokovna literatura 2

- G. L. Patrick: An Introduction to MEDICINAL CHEMISTRY
- 4th Edition, 2009

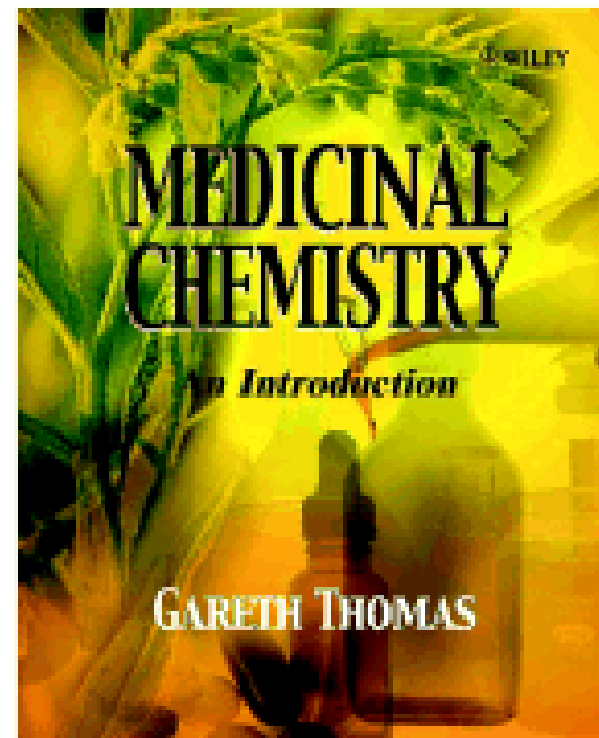






# Strokovna literatura 3

- Gareth Thomas: MEDICINAL CHEMISTRY, An Introduction
- 2000





# E - predavanja

- Na spletni strani FFA
- <http://www.ffa.uni-lj.si/o-fakulteti/katedre/katedra-za-farmaceutsko-kemijo/studijska-gradiva.html>
- [http://www.ffa.uni-lj.si/o-fakulteti/studentske-strani/studijska-gradiva\\_535.html](http://www.ffa.uni-lj.si/o-fakulteti/studentske-strani/studijska-gradiva_535.html)



# Literatura - vaje

- Učbenik – tiskana verzija
- Spletna verzija: [klik](#)
- Laboratorijski zvezek / poročila

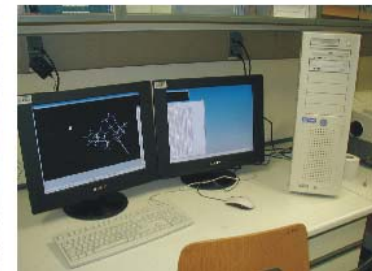


Universitas Labacensis  
"Kultura dan kerajinan"



M. Anderluh, J. Mravljak, M. Sova, A. Perdih and S. Pečar

**MEDICINAL CHEMISTRY III**  
**Laboratory practice and seminars**





# Literatura - seminarji

- Računanje logP – učbenik/splet
- Molekulsko modeliranje – učbenik/splet



# Farmaceutvska kemija 3

- Medicinal Chemistry
- A field which applies the principles of chemistry and biology to the creation of knowledge leading to the introduction of new therapeutic agents.
- The medical chemist must not be only a competent organic chemist but he must have a basic background in life sciences particularly biochemistry and pharmacology.
- ACS
- Wikipedia



# Farmaceutvska kemija 3

- Medicinal Chemistry
- Je interdisciplinarna znanost kot vmesni člen med živlenskimi znanostmi (life sciences) kot so: biokemija, farmakologija, molekularna biologija, imunologija, farmakokinetika in toksikologija na eni strani ter kemično usmerjenimi disciplinami: organska kemija, fizikalna kemija, kristalografija, spektroskopija in računalniško podprte informacijske tehnologije na drugi strani

Medicinal Chemistry

Kemično usmerjene  
discipline

“Life Sciences”



# Farmaceutvska kemija - sinonimi

Zdravilska kemija

Pharmacochemistry

Molecular pharmacochemistry

Bioorganic chemistry

Drug design

**Chimie Therapeutique**

**Arzneimittelforschung**

**Wirkstoff-forschung**



# Glavno področje FK

- Odkrivanje novih spojin vodnic
- Optimizacija spojine vodnice do učinkovine
- Razvoj do nove zdravilne učinkovine (in naprej do zdravila)





# FK3 - cilji

- Nove učinkovine – nova zdravila



=





## FK3 cilji

- Razlaga biološkega učinka – usmerjenost v molekulo
- Odnos med strukturo in delovanjem, metabolizmom, porazdelitvenimi lastnostmi molekule v telesu
- [http://www.birdlife.org/action/science/species/asia\\_vulture\\_crisis/diclofenac.html](http://www.birdlife.org/action/science/species/asia_vulture_crisis/diclofenac.html)



VOLTAREN svečke 25 mg - Windows Internet Explorer  
http://www.ivz.si/register/3597.HTM

File Edit View Favorites Tools Help

Convert Select

Favorites Open Innovation Drug Dis... PAMAM dendrimer, ethyl... All Standard Subsets ZIN... Natural Product Commun... Fuzbal - Google Dokumenti GourmetGuerrilla » Schnell... AIDS Research Alliance Er... Radio Swiss Jazz - Music P...

TYPO3 Login: w... D-mannose | Si... Acros Organics eMolecules.co... A10842 D-(+)-... A19618 1,3-Dia... Diclofenac - the... voltaren svečke ... NUINO- Voltare... VOLTAREN s... X

## VOLTAREN svečke 25 mg

**diklofenak 25mg**

**Pliva Predst.**  
(Pliva)

**M01A - Nesteroidna protivnetna in protirevmatična zdravila**

Rp	svečka	10 x 25 mg	P75	1,81 EUR	035149	do: 1.7.2009
----	--------	------------	-----	----------	--------	--------------

Odmerjanje: peroralno, rektalno: odrasli: običajno 50 - 200 mg na dan, razdeljeno na 2 do 3 odmerke, za blage bolečine do 100 mg na dan, bolnice z dismenorejo običajno 150 mg na dan, pri napadih migrene 50 mg vsakih 4 do 6 ur; največji dnevni odmerek je 200 mg; otroci starejši od 14 let in bolniki z blažjimi bolečinami: 75 do 100 mg na dan; parenteralno: odrasli in otroci nad 14 let: i.m. 1 - 3 x 75 mg na dan; največji dnevni odmerek je 200 mg.

Iskanje paralel po sestavi zdravila

- diklofenak
  - o [Diclo Duo 75 mg trde gastrorezistentne kapsule](#)
  - o [DicloJet 75 mg trde gastrorezistentne kapsule](#)
  - o [Naclof 1 mg/ml kapljice za oko, raztopina](#)
  - o [Naklofen 25 mg/ml raztopina za injiciranje](#)
  - o [Naklofen duo 75 mg kapsule](#)
  - o [Naklofen SR 100 mg tablete s podaljšanim sproščanjem](#)
  - o [Naklofen 50 mg svečke](#)
  - o [Naklofen 50 mg gastrorezistentne tablete](#)
  - o [Olfen 50 mg filmsko obložene tablete](#)
  - o [Olfen 100 mg trde kapsule s podaljšanim sproščanjem](#)
  - o [VOLTAREN FORTE obložene tablete 50 mg](#)
  - o [VOLTAREN RAPID 50 mg obložene tablete](#)
  - o [VOLTAREN RETARD filmsko obložene tablete s podaljšanim sproščanjem 100 mg](#)
  - o [VOLTAREN svečke 12,5 mg](#)
  - o [VOLTAREN svečke 25 mg](#)
  - o [Voltarten Dolo 12,5 mg filmsko obložene tablete](#)
  - o [Voltaren Emulgel 11,6 mg/g gel](#)
  - o [Voltaren Emulgel 11,6 mg/g gel](#)
  - o [Voltaren Emulgel 11,6 mg/g gel](#)
  - o [Voltaren Emulgel 11,6 mg/g gel tlačni vsčbnik](#)
  - o [Voltaren Emulgel 11,6 mg/g gel](#)

[Razpored zdravil po zaščitenem imenu zdravila in po ATC klasifikaciji](#)

SL 13:25 1.10.2012



Uspešen začetek v š.l. 2011/2012!