

A tantárgy neve:	magyarul:	A gyógyszerkutatás kémiai vonatkozásai						Kódja:	TTKME0314	
	angolul:	Chemical aspects of drug design								
A képzés 3. féléve (2. tavaszi félév)										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Szerves Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:								Kódja:		
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	X	Heti	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Somsák László				beosztása:	egyetemi tanár	
A kurzus célja , hogy a hallgatók betekintést nyerjenek a gyógyszerek megtalálásának/felfedezésének, tervezésének és előállításának komplex folyamatába.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató <i>Tudás:</i> Megismeri a gyógyszerek és a gyógyszer-célpontok fogalmát, típusait, a gyógyszerek hatásmódjait és az azt befolyásoló tényezőket. Elsajátítja a gyógyszertervezés és -fejlesztés mai gyakorlatát/alapelemeit. <i>Képesség:</i> Képes a gyógyszertervezéssel és -fejlesztéssel kapcsolatos irodalmi és szabadalmi információk kritikai értelmezésére. <i>Attitűd:</i> A megszerzett ismeretekre építve továbbképzzi magát a gyógyszerkutatás és fejlesztés, illetve ezek ipari vonatkozásai területén. <i>Autonómia és felelősség:</i> A kurzus ismeretei segítségével beilleszkedik gyógyszerfejlesztő csapatok tevékenységébe. Képviseli a bizonyítékokon alapuló gyógyszerhatásmódokat egyéb (pl. homeopátiás) felfogásokkal szemben.										
A kurzus tartalma, témakörei A gyógyszerek, mint kémiai, jogi és kereskedelmi entitások. A gyógyszerek hatásának kialakulásáért felelős intermolekuláris kölcsönhatások. Kismolekula és biológiai célpont kölcsönhatásának jellemzése. Gyógyszer-célpontok, farmakodinámia, farmakokinetika. Szerkezet-hatás összefüggések, esettanulmányok.										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek Interaktív előadás, aktív részvétel az órákon.										
Értékelés A tárgy szóbeli kollokviummal zárul, melynek sikertelensége esetén a TVSZ rendelkezései az irányadóak.										
Kötelező olvasmány: Az előadáshoz kapcsolódó ábra- és fogalomgyűjtemény.										
Ajánlott szakirodalom: G. L. Patrick: An introduction to medicinal chemistry, 4th edition, Oxford University Press, New York, 2009. (978-0-19-923447-9) R. B. Silverman, M. W. Holladay: The organic chemistry of drug design and drug action, 3rd ed., Academic Press, 2012. (978-0-12-382030-3) H. J. Smith, C. Simons (Eds.): Enzymes and their inhibition – Drug development. CRC Press, Boca Raton, 2005. Keserű György Miklós: A gyógyszerkutatás kémiája, Akadémiai Kiadó, 2012. (978 963 05 9076 1) Faigl F., Szeghy L., Kovács E., Mátravölgyi B. Gyógyszerek, Typotex Kiadó, 2011. (978-963-279-476-1) http://www.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop425/0028_FaiglF_Gyogyszerek/adatok.html										

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>A gyógyszerek fogalma, típusai, hatásmódjai. Intermolekuláris kölcsönhatások, hidrofób/szolvofób effektusok. Fehérjealkotó aminosavak oldalláncainak részvétele másodlagos kötésekben.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató tájékozottságot szerez a gyógyszerekkel kapcsolatos kémiai és jogi fogalmak körében, megismeri alapvető hatásmódjaikat. Megismeri a klasszikus másodlagos kötőerő-kön túl az intermolekuláris kölcsönhatásokban szerepet játszó egyéb effektusokat, pl halogénkötést, stb.</p>
2. hét	<p>Kismolekula–biológiai makromolekula kölcsönhatás jellemzése: kötési energia és komponensei (entalpia, entrópia), flexibilitás, szolvatáció, taszítóerők, molekula-alak, térizoméria (konfiguráció, konformáció) szerepe. Entalpia-entrópia kompenzáció. Izosztéria, bioizosztéria.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a gyógyszer-molekulák és célpontjaik közötti kölcsönhatás termodinamikai jellemzését, ennek kísérleti meghatározását, illetve változásait a molekul szerkezet függvényében.</p>
3. hét	<p>Gyógyszercélpontok csoportosítása. Receptorok, receptor-kismolekula komplex jellemzése: affinitás (disszociációs állandó), hatékonyság. Agonisták, antagonisták definíciója, modellezése.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megtanulja csoportosítani a gyógyszerek célpontjaiként szolgáló makromolekulákat, jártasságot szerez a receptortípusok körében és befolyásolásuk lehetőségeiben.</p>
4. hét	<p>Enzimek, mint gyógyszercélpontok. Az enzimkatalízis molekuláris szintű jellemzése. Kofaktorok, koenzimek szerkezete és működése.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató ismétlő jelleggel áttekinti a biokatalizátorok működését, megismeri az enzimkatalízis hatékonyságához hozzájáruló kölcsönhatásokat és jelenségeket.</p>
5. hét	<p>Enzimgátlók típusai: reverzibilis (kompetitív, nem-kompetitív, unkompetitív, átmeneti állapot analóg), irreverzibilis (affinitásjelölők, mechanizmus-alapú inaktívátorok). Enzim inhibitorok a gyógyszerfejlesztésben.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató az enzimkatalízisre gyakorolt hatásuk alapján csoportosítani tudja az inhibitorokat, ismeri a gyógyszerfejlesztés során alkalmazható szempontokat.</p>
6. hét	<p>Nukleinsavak, mint gyógyszercélpontok. Kis molekulák és nukleinsavak kölcsönhatásai. DNS alkilezés. DNS lánchasítás. Antisense terápia. Transzportfehérjék, szerkezeti fehérjék, lipidek, mint gyógyszercélpontok.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató jártasságot szerez a nukleinsavakkal kölcsönható gyógyszerhatóanyagok hatásmechanizmus szerinti osztályozásában. Megismeri egyéb fehérjék alkalmazását gyógyszer-célpontként.</p>
7. hét	<p>Farmakodinámia és farmakokinetika. ADMET sajátságok.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató jártasságot szerez a gyógyszerhatóanyagok élő szervezetre gyakorolt hatásainak, valamint a szervezet hatóanyagokra kifejtett hatásainak áttekintésében.</p>
8. hét	<p>A gyógyszer, mint áru. A kémiai biológia és a gyógyszertervezés. A gyógyszertervezés és -fejlesztés, mint multi- és interdiszciplináris folyamat. A gyógyszerfejlesztés mai gyakorlata, fázisai és problémái.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a modern gyógyszerfejlesztési folyamat részlépéseit, az ennek során alkalmazott különböző megközelítéseket, a kémiai, biológiai, technológiai, iparjogvédelmi, kereskedelmi szempontok együttes alkalmazását.</p>
9. hét	<p>Gyógyszerek megtalálása/felfedezése és tervezése. Találatok, vezérmolekulák, optimalizált vezérmolekulák. A korai fejlesztési fázis összetevői.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató betekintést nyer a gyógyszerkincs összetevőinek megtalálása és/vagy innovatív tervezése folyamatába.</p>
10. hét	<p>Farmakodinamikai sajátságok optimalizálása.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a biológiailag aktív anyagok hatásának módosítási lehetőségeit.</p>
11. hét	<p>Farmakokinetikai sajátságok optimalizálása. Prodrug koncepció.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a gyógyszerhatóanyagok felszívódási, eloszlási, átalakulási és kiválasztási sajátságainak módosítási lehetőségeit.</p>

12. hét	<p>Szerkezet-hatás összefüggések.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató betekintést kap a hatóanyag molekulák szerkezete és a kifejtett biológiai hatás összefüggéseibe, ezek kvalitatív és kvantitatív leírásába, alkalmazásukra a molekulatervezésben.</p>
13. hét	<p>Esettanulmányok.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató gyógyszerfejlesztési esetek bemutatásán keresztül képet kap a tanultak alkalmazásáról.</p>
14. hét	<p>Esettanulmányok.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató gyógyszerfejlesztési esetek bemutatásán keresztül képet kap a tanultak alkalmazásáról.</p>