

Τίτλος Μαθήματος	Σχεδιασμός και Ανακάλυψη Νέων Φαρμάκων				
Κωδικός Μαθήματος	PHA230				
Τύπος μαθήματος	Υποχρεωτικό				
Επίπεδο	Ενιαίος και Αδιάσπαστος Τίτλος Σπουδών Μεταπτυχιακού Επιπέδου				
Έτος / Εξάμηνο φοίτησης	2 <sup>ο</sup> Έτος / 4 <sup>ο</sup> Εξάμηνο				
Όνομα Διδάσκοντα	Θα ανακοινωθεί				
ECTS	3	Διαλέξεις / εβδομάδα	2 ώρες /14 εβδομάδες	Εργαστήρια / εβδομάδα	1 ώρα /14 εβδομάδες
Στόχοι Μαθήματος	<p>Το μάθημα «Σχεδιασμός και Ανακάλυψη Νέων Φαρμάκων» έχει στόχο την παρουσίαση των βασικών μεθόδων που χρησιμοποιούνται για το σχεδιασμό νέων φαρμάκων, των διαθέσιμων εργαλείων (λογισμικό μοριακού μοντελισμού, φασματοσκοπία κ.α.) καθώς και των σταδίων που ακολουθούνται κατά ανάπτυξη και έγκριση των νέων φαρμάκων. Επίσης αναλύονται θέματα που αφορούν την πνευματική ιδιοκτησία, την υφιστάμενη νομοθεσία και το ρόλο των Οργανισμών φαρμάκων.</p>				
Μαθησιακά Αποτελέσματα	<p>Με την ολοκλήρωση του μαθήματος ο διδασκόμενος αναμένεται να είναι σε θέση να:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Εφαρμόζει τις βασικές αρχές για την ανακάλυψη, τον σχεδιασμό και την ανάπτυξη νέων φαρμάκων.</li> <li>• Αναγνωρίζει τη σημασία των ποσοτικών σχέσεων δομής δράσης στο σχεδιασμό νέων φαρμακομορίων.</li> <li>• Περιγράφει τη χρήση λογισμικού μοριακού μοντελισμού και τις εφαρμογές του στον σχεδιασμό νέο φαρμάκων.</li> <li>• Αναλύει τη διαδικασία ανάπτυξης και έγκρισης νέων φαρμάκων.</li> </ul>				
Προαπαιτούμενα	Κανένα	Συναπαιτούμενα	Κανένα		
Περιεχόμενο Μαθήματος	<p><u>Θεωρία</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Εισαγωγή, Ιστορική αναδρομή, Η προκανονιστική εποχή. Φυσικά προϊόντα. Συνθετικά προϊόντα. Η ανάγκη για ρύθμιση και ανάπτυξη κανονιστικού πλαισίου.</li> <li>- Τα στάδια του σχεδιασμού και της ανάπτυξης νέων φαρμάκων. Το κόστος ανάπτυξης νέων φαρμάκων. Ευκαιρίες και προκλήσεις. Σχεδιασμός με βάση το στόχο, (target based design) με βάση το φαινότυπο (phenotype based design), ενδιάμεση προσέγγιση (mixed approach). Πνευματική Ιδιοκτησία.</li> <li>- Αλληλεπίδραση Φαρμακομορίων Μακρομορίων: Μοριακοί στόχοι των φαρμάκων: Πρωτεΐνες (ανάλυση δομής), Συμβολή των τεχνικών: ακτίνες X κρυσταλλογραφία και φασματοσκοπία NMR.</li> <li>- Ένζυμα: (Κινητική Michaelis Menten, Ενζυμική αναστολή).</li> </ul>				

	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Υποδοχείς: (τύποι, προσδέματα, θεωρίες σύνδεσης).</li> <li>- Σχεδιασμός Φαρμάκων και μεταβολισμός-Προφάρμακα.</li> <li>- Σχεδιασμός Φαρμάκων και μεταβολισμός- ADME.</li> <li>- Εισαγωγή στις μοριακές αλληλεπιδράσεις και την μοριακή δυναμική Σύνδεση, Δομή και Μοριακή Μεταβλητότητα, Μοριακές Βιβλιοθήκες.</li> <li>- Ανακάλυψη ένωσης οδηγού Σχεδιασμός με διάφορες τεχνικές SBDD, LBDD, FBDD, CADD.</li> <li>- Βελτιστοποίηση ένωσης οδηγού, Ποσοτικές σχέσεις δομής δράσης: γραμμικές και μη γραμμικές εξισώσεις, Στατιστικές αρχές και φυσικοχημικές παράμετροι.</li> </ul> <p><u>Εργαστήριο</u></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Λογισμικό ChemScketch, MedChem Designer, SMILES.</li> <li>- Λογισμικό Molinspiration.</li> <li>- Χρήση PDB και επεξήγηση λημμάτων. Ramachadran Plots.</li> <li>- Υπολογισμοί Km, Lineweaver Burk, τύποι αναστολής, Ki μέτρηση ενζυμικής αναστολής.</li> <li>- Υπολογισμοί Σύνδεση με υποδοχείς και υπολογισμός απόκρισης Ερμηνεία διαγραμμάτων φαρμακοδυναμικής απόκρισης.</li> <li>- Drug Data Bank, Lipinski Rule of 5.</li> <li>- Λογισμικό ADMETSAR.</li> <li>- Πρόβλεψη μεταβολιτών.</li> <li>- Υπολογισμός μοριακής ομοιότητας,</li> <li>- Σχεδιασμός νέων προσδεμάτων με το λογισμικό SeeSAR.</li> </ul>
Μεθοδολογία Διδασκαλίας	Διδασκαλία στην τάξη
Βιβλιογραφία	<p>Φαρμακοχημεία Κόκοτος, Γεώργιος-Ισίδωρος Μαγκριώτη, Βικτωρία Αποθετήριο Κάλλιπος:  <a href="https://repository.kallipos.gr/handle/11419/1923">https://repository.kallipos.gr/handle/11419/1923</a>      Διαθέσιμο στο:  <a href="https://repository.kallipos.gr/bitstream/11419/1923/1/00_master%20document.pdf">https://repository.kallipos.gr/bitstream/11419/1923/1/00_master%20document.pdf</a></p> <p>Βασικές αρχές σχεδιασμού και ανάπτυξης φαρμάκων, Δημόπουλος, Βασίλειος, Τσαντίλη-Κακουλίδου, Άννα Σχεδιασμός φαρμάκων, Φαρμακοχημεία, Φαρμακευτική χημεία, Αποθετήριο Κάλλιπος:  <a href="https://repository.kallipos.gr/handle/11419/5881">https://repository.kallipos.gr/handle/11419/5881</a>      Διαθέσιμο στο:  <a href="https://repository.kallipos.gr/bitstream/11419/5881/5/00_master_document_Nov.pdf">https://repository.kallipos.gr/bitstream/11419/5881/5/00_master_document_Nov.pdf</a></p> <p>New Drug Development: Design, Methodology, and Analysis J. Rick Turner John Wiley &amp; Sons, 2007.</p> <p>«Οργανική Φαρμακευτική Χημεία, Θέματα Φαρμακοχημείας-Σχεδιασμού φαρμάκων», Ε.Α. Ρεκκα, Π.Ν. Κουρουνάκης, Εκδ. Φ. Χατζηπάντου, Θεσσαλονίκη 2010.</p> <p>Smith, H.J. Williams H, Eds, Introduction to the Principles of Drug Design, Wright, Boston.</p>

	<p>Cohen, N. R. (Ed.), Guidebook on Molecular Modeling in Drug Design, Academic Press, San Diego.</p> <p>Martin Y.C., Quantitative Drug Design, Dekker, New York.</p> <p>Webpages: <a href="http://www.ema.europa.eu">www.ema.europa.eu</a>, <a href="http://www.fda.gov">www.fda.gov</a></p>		
Αξιολόγηση	Εξετάσεις	70%	
	Εργασίες	20%	
	Παρουσία & Συμμετοχή στην τάξη	10%	
		100%	
Γλώσσα	Ελληνικά και Αγγλικά		