

RTU studiju kurss "Medicīnas ķīmijas izmeklētās nodaļas"**32000 Dabaszinātņu un tehnoloģiju fakultāte****Vispārējā informācija**

Kods	ĶOS751
Nosaukums	Medicīnas ķīmijas izmeklētās nodaļas
Studiju kursa statuss programmā	Obligātais/Ierobežotās izvēles; Brīvās izvēles
Atbildīgais mācītspēks	Aigars Jirgensons - Doktors, Profesors
Mācītspēks	Inese Mieriņa - Doktors, Institūta direktors Māra Jure - Doktors, Profesors
Apjoms daļās un kredītpunktos	1 daļa, 15.0 kredītpunkti
Studiju kursa īstenošanas valodas	LV, EN
Anotācija	Studiju kursā tiek apskatīts zāļu atklāšanas process no koncepta līdz klīniskajam kandidātam: zāļu mērķi; līdersavienojumu atklāšanas un attīstīšanas metodes, ieskaitot modernās zāļu atklāšanas pieejas.
Mērķis un uzdevumi, izteikti kompetencēs un prasmēs	Studiju kursa mērķis ir sniegt padziļinātas zināšanas par jaunu zāļu atklāšanas pamatposmiem un principiem, dot prasmes par datormodelēšanas pielietojumu jaunu zāļu atklāšanā un attīstīt kompetences, kas ļauj iesaistīties medicīnas ķīmijas projektos. Studiju kursa uzdevums ir sniegt zināšanas par galvenajiem atklāšanas posmiem, dot izpratni zāļu mērķiem, attīstīt kompetences dažādās līdersavienojumu atklāšanas un attīstīšanas pieejās, veicināt izpratni par ADMET īpašībām un to uzlabošanas iespējām.
Patstāvīgais darbs, tā organizācija un uzdevumi	Veikt literatūras analīzi un sagatavot prezentāciju par brīvi izvēlētu bioloģisko mērķi, tā farmakoloģisko nozīmi, uzbūvi, zināmajiem ligandiem. Piedāvāt jaunu ligandu atklāšanas pieejas dotajam molekulārajam mērķim, izmantojot visas studiju kursa ietvaros apskatītās metodes.
Literatūra	Obligātā / Obligatory: 1. Graham L. Patrick. An Introduction to Medicinal Chemistry. 3rd ed., Oxford; New York: Oxford University Press 2005. 2. Dunlap, Norma K. Medicinal chemistry. New York: Garland Science, Taylor & Francis Group, LLC, 2018. Papildu / Additional: 1. Camille-Georges Wermuth. The Practice of Medicinal Chemistry. 3rd ed. Elsevier Exclusive, 2008. 1. Povl Krogsgaard-Larsen, Tommy Liljefors, Ulf Madsen. Textbook of Drug Design and Discovery. 3rd ed. Taylor & Francis Inc. 2002. 2. Rick Ng. Drugs-From Discovery to Approval. Wiley-Blackwell, 2004. 3. Thomas L. Lemke, David A Williams. Foye's Principles of Medicinal Chemistry. 6th ed. Lippincott Williams & Wilkins, 2007. 4. Scientific journals: Journal of Medicinal Chemistry, Drug Discovery Today, Nature Reviews Drug Discovery.
Nepieciešamās priekšzināšanas	Bioķīmija, organiskā ķīmija.

Studiju kursa saturs

Saturs	Pilna un nepilna laika klātienes studijas		Nepilna laika neklātienes studijas	
	Kontakt stundas	Patstāv. darbs	Kontakt stundas	Patstāv. darbs
Galvenie zāļu atklāšanas un attīstīšanas posmi.	4	5	0	0
Intelektuālā īpašuma aizsardzība.	8	5	0	0
Klīnisko pētījumu fāzes, reģistrēšana un mārketing.	4	5	0	0
Zāļu mērķi: lipīdi, ogļhidrāti, proteīni un nukleīnskābes.	4	5	0	0
ADMET īpašību uzlabošana: aizvietošanu nomaina, cikla izmēri.	5	5	0	0
Zāļu mērķi: proteīnu struktūra un struktūras noteikšanas metodes.	7	5	0	0
Zāļu mērķi: ligandu - proteīnu mijiedarbība.	6	5	0	0
Zāļu mērķi: ligandu saistīšanās pie jonotropajiem un metabotropajiem receptoriem.	7	5	0	0
Funkcionālie efekti: agonisti, antagonist, parciālie antagonist, inversie agonisti.	6	5	0	0
In vitro un in vivo bioķīmiskie testi: radioligandu un fluorescences metodes, funkcionālie testi, šūnu testi.	6	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: augstas caurlaidības skrīnings (HTS).	6	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: virtuālais HTS.	6	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: zāļu atklāšanas fragmentu pieeja.	5	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: dabasvielas un to atvasinājumi.	6	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: endogēno receptoru ligandu atvasinājumi.	5	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: enzīmu inhibitoru atklāšana.	6	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: blakusefektu pastiprināšana.	5	5	0	0

Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: "me too" pieeja un "repourpusing".	5	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: bāzes struktūras nomaīņa.	5	5	0	0
Līdersavienojumu atklāšana un attīstīšana: līgandu un proteīnu mijiedarbības modelēšana.	5	10	0	0
ADMET īpašību uzlabošana: bioloģiskās membrānas.	5	5	0	0
ADMET īpašību uzlabošana: metabolās stabilitātes uzlabošana, toksicitātes mazināšana, šķīdības uzlabošana, šūnu caurlaidības uzlabošana.	4	5	0	0
ADMET īpašību uzlabošana: prozāles.	4	5	0	0
ADMET īpašību uzlabošana: bioizostēri, bioizostērā aizvietošana.	5	5	0	0
Modernās zāļvielu atklāšanas pieejas: fotofarmakoloģija.	5	10	0	0
Modernās zāļvielu atklāšanas pieejas: proteīnu degradējošās himēras (PROTACs).	5	5	0	0
Modernās zāļvielu atklāšanas pieejas: antivielu-zāļvielu konjugāti (ADC).	5	10	0	0
Modernās zāļvielu atklāšanas pieejas: Ribonukleāzi saistošās himēras (RIBOTACS).	5	5	0	0
Modernās zāļvielu atklāšanas pieejas: DNS kodētās bibliotēkas (DELs).	6	10	0	0
Praktiskais darbs par zāļvielu datormodelēšanu.	3	5	0	0
Projekta darba izstrāde un prezentācija.	5	20	0	0
Kontroldarbi.	4	20	0	0
Eksāmens.	3	20	0	0
Kopā:	170	230	0	0

Sasniedzamie studiju rezultāti un to vērtēšana

Sasniedzamie studiju rezultāti	Rezultātu vērtēšanas metodes
Spēj veikt vienkāršu zāļvielu datormodelēšanas uzdevumu.	Praktiskais darbs. Veikta receptora un liganda mijiedarbības datormodelēšana.
Spēj analizēt un novērtēt literatūrā pieejamo informāciju saistībā ar doto slimības indikāciju, tajā iesaistītajiem bioloģiskajiem mērķiem.	Projekta izstrāde un prezentācija. Kritiski analizē literatūras datus par slimību indikācijām, nosaka bioloģisko mērķi.
Pārzina jaunu zāļvielu atklāšanas un attīstīšanas metodes.	Kontroldarbi. Eksāmens. Izvēlas definētai problēmai piemērotāko zāļvielu atklāšanas un attīstīšanas metodi.
Spēj izstrādāt zāļvielu izveidošanas stratēģiju, izmantojot mūsdienīgās aktīvo savienojumu atklāšanas pieejas.	Eksāmens. Apraksta un izskaidro aktīvo savienojumu atklāšanas pieejas. Izstrādā un pamato definētai problēmai piemērotāko zāļvielas izveidošanas stratēģiju.

Studiju rezultātu vērtēšanas kritēriji

Kritērijs	% no kopējā vērtējuma
Kontroldarbi	40
Praktiskais darbs	20
Projekts un tā prezentācija	20
Eksāmens	20
Kopā:	100

Studiju kursa plānojums

Daļa	KP	Stundas			Pārbaudījumi			Brīvās izvēles pārbaudījumi		
		Lekcijas	Prakt d.	Laborat	Ieskaite	Eksām.	Darbs	Ieskaite	Eksām.	Darbs
1.	15.0	8.0	2.0	0.0		*			*	