



INSTITUTIONEN FÖR KEMI OCH MOLEKYLÄRBIOLOGI

KEM760 Avancerad läkemedelskemi, 15 högskolepoäng

Advanced Medicinal Chemistry, 15 credits

Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Institutionen för kemi och molekylärbiologi 2016-09-01 och senast reviderad 2017-10-06. Den reviderade kursplanen gäller från och med 2017-10-06, höstterminen 2017.

Utbildningsområde: Naturvetenskapligt 100 %

Ansvarig institution: Institutionen för kemi och molekylärbiologi

Inplacering

Kursen är inplacerad på avancerad nivå och kan läsas som fristående kurs.

Kursen kan ingå i följande program: 1) Organisk kemi och läkemedelskemi, masterprogram (N2KEL) och 2) Kemi, masterprogram (N2KEM)

Huvudområde

Kemi

Fördjupning

A1F, Avancerad nivå, har kurs/er på avancerad nivå som förkunskapskrav

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs godkända kurser omfattande 90 hp inom ämnet kemi, inklusive kurserna KEM815 Avancerad organisk kemi (15 hp) och KEM825 Organisk kemi och läkemedelskemi (10 hp) eller motsvarande kurser, dessutom Engelska B/Engelska 6 eller motsvarande. Studerande med likvärdig utbildning kan efter prövning beredas tillträde till kursen.

Lärandemål

Efter genomgången kurs skall den studerande kunna:

Kunskap och förståelse

- **beskriva** strategier för design och syntes av potentiella "lead compounds",
- **förklara** viktiga metoder och teorier för design och syntes av "lead compounds",
- **beskriva** metoder för biologisk evaluering av substanser.

Färdigheter och förmåga

- **använda** datorbaserade metoder (computational chemistry) för att designa potentiella "lead compounds" samt för att studera och lösa läkemedelskemiska problem,
- **utföra** grundläggande retrosyntetisk analys,
- **föreslå** syntesmetoder för läkemedelssubstanser.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

- **förklara** viktiga metoder och teorier för evaluering av "lead compounds" och **tillämpa** dem på konkreta fall,
- **kritiskt analysera** vetenskapliga publikationer,
- klart **redogöra för** och **diskutera** sina slutsatser, samt den kunskap och de argument som ligger till grund för dessa, båda muntligt och skriftligt.

Innehåll

Kursen skall ge fördjupade kunskaper i design, syntes och biologisk evaluering av små organiska substanser som potentiella "lead compounds".

A. Teori*Design av substanser:*

- Konformationsanalys och grundläggande kemiinformatik; kraftfält, energiminimering, 3D, farmakoforidentifiering. Substruktursökning, similarity-sökning, databaser
- Fysikalisk-kemiska egenskaper; drug-likeness, design (diversitet, scaffold-hopping)
- Halogener i biologiskt aktiva organiska substanser
- Proteiner: strukturer, protein-ligand-interaktioner, sekvens/struktur-homologi, strukturbaserad design, dockning

Syntes av substanser

- Retrosyntetisk analys
- Diversitetsorienterad syntes
- Scaffold-baserad syntes där exempelvis bensodiazepiner, piperidinoner, indoler, puriner och bensofuraner används

Biologisk evaluering av substanser

- Cellfria assays
- Helcellsassays
- Djurassays

B. Datorlaborationer

Beräkningskemi: struktur, energier, konformationsanalys av små molekyler; studier av biomolekyler och växelverkan mellan läkemedelsmolekyler och receptorer, rationell design, strukturbaserad design, dockning.

Former för undervisning

Undervisningen ges i form av föreläsningar, gruppövningar, projektuppgifter, datorlaborationer och litteraturseminarier. Gruppövningar, projektuppgifter, datorlaborationer och seminarier är obligatoriska.

Undervisningsspråk: engelska och svenska

Kursen ges som huvudregel på engelska men kan ges helt eller delvis på svenska om omständigheterna medger det.

Former för bedömning

Svar på projektuppgifter som redovisas skriftligt och muntligt kommer att ligga till grund för slutbetyget på kursen. Ett slutprov, vanligen skriftligt, anordnas vid kursens slut.

För studerande som ej godkänts vid ordinarie examenstillfälle erbjuds ytterligare tillfällen.

Student som har underkänts två gånger på samma examinerande moment äger rätt till byte av examinator, om det är praktiskt möjligt.

Betyg

På kursen ges något av betygen Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U). För godkänt resultat på laborationsdelen krävs godkända laborationsresultat samt att muntlig och skriftlig projektredovisning har skett med godkänt resultat.

Angående tillämpning av ECTS-skalan för betyg var god se Rektors beslut 2007-05-28, dnr G 8 1976/07

Kursvärdering

Kursen utvärderas och resultaten blir föremål för diskussion mellan lärarna på kursen och representanter för studenterna. Minnesanteckningar från denna diskussion, tillsammans med skriftlig kursvärdering, rapporteras till studieexpeditionen för kemi

där den är tillgänglig som allmän handling.