

INFORMAČNÝ LIST PREDMETU

Akademický rok: 2024/2025	
Vysoká škola: Univerzita Komenského v Bratislave	
Fakulta: Farmaceutická fakulta	
Kód predmetu: FaF.KFCh/05-Mgr/00	Názov predmetu: Farmaceutická chémia (1)
Druh, rozsah a metóda vzdelávacích činností: Forma výučby: prednáška / seminár Odporúčaný rozsah výučby (v hodinách): Týždenný: 2 / 1 Za obdobie štúdia: 28 / 14 Metóda štúdia: prezenčná	
Počet kreditov: 5	
Odporúčaný semester/trimester štúdia: 5.	
Stupeň štúdia: I.II.	
Podmieňujúce predmety:	
Odporúčané prerekvizity (nepovinné): Odporúčanie. Pre zapísanie predmetu Farmaceutická chémia (1) je odporúčané úspešné absolvovanie týchto predmetov (s udeleným finálnym hodnotením A–E): KCHTL/01-Mgr/00 Organická chémia (1), KCHTL/02-Mgr/00 Organická chémia (2), KFANF/01-Mgr/00 Analytická chémia (1), KFANF/02-Mgr/00 Analytická chémia (2) a KBMBL/03-Mgr/00 Biochémia.	
Podmienky na absolvovanie predmetu: a) Absolvovanie prednášok (povinná forma výučby!) – študent je povinný absolvovať prednášky v plnom rozsahu podľa harmonogramu zverejneného na oficiálnej výveske/webovom sídle Katedry farmaceutickej chémie FaF UK; absolvovanie seminárov – študent je povinný absolvovať semináre v celom rozsahu podľa harmonogramu zverejneného na oficiálnej výveske/webovom sídle Katedry farmaceutickej chémie FaF UK. b) Absolvovanie všetkých predpísaných kontrol priebežného hodnotenia s dosiahnutím adekvátnej percentuálnej úspešnosti. Na 3. a 5. seminári budú písomne overené vedomosti študentov (dva testy); koncipovanie testov, ich oprava a aj udeľovanie priebežného hodnotenia bude v kompetencii vyučujúcich – vedúcich semináru. Každé priebežné hodnotenie (každý test) bude pozostávať z otázok, ktoré budú koncipované podľa tématických okruhov uvedených v sylabách prednášok a aj seminárov. Pre úspešné absolvovanie seminárov je nevyhnutné, aby študent získal z každého priebežného hodnotenia (z každého testu) minimálne 60% z maximálneho bodového hodnotenia. c) Udelenie záverečného hodnotenia (skúšky) z predmetu Farmaceutická chémia (1) Celkové trvanie písomnej skúšky z predmetu Farmaceutická chémia (1) je 120 min; termíny, časy a miestnosti pre skúšky budú uvedené v AIS-2. Študent sa registruje na skúšku v konkrétnom termíne výhradne prostredníctvom AIS-2; iba ten študent, ktorého účasť na konkrétnom termíne je riadne registrovaná cez tento elektronický systém, sa môže skúšky zúčastniť. Účasť študenta na skúške z predmetu Farmaceutická chémia (1) je podmienená splnením všetkých požiadaviek, ktoré sú uvedené v častiach a) a b).	

Skúška z predmetu Farmaceutická chémia (1) bude prebiehať písomnou formou, t.j. študent vyplní test, ktorý bude pozostávať z 25 otázok a z ktorých každá bude hodnotená 2 bodmi (maximálne dosiahnuteľný počet bodov zo skúšky: 50 bodov).

Súbor testových otázok bude koncipovaný zo všetkých tématických celkov, ktoré sú uvedené v sylabuse prednášok a aj seminárov, t.j. budú v ňom obsiahnuté i) vedomosti zo všeobecnej farmaceutickej chémie, ii) definície, chemické klasifikácie konkrétnych farmakodynamických skupín (s precíznym chemickým zaradením a vymenovaním príslušných liečiv), iii) znázornenia chemických štruktúr vybraných liečiv, iv) detailné hodnotenia vzťahov medzi chemickou štruktúrou a biologickou aktivitou, štruktúrou a farmakokinetikou a aj štruktúrou a toxicitou (vrátane prehľadnej všeobecnej chemickej štruktúry liečiv príslušnej skupiny a aj chemickej štruktúry minimálne jedného relevantného liečiva) a v) poznatky o všeobecných biotransformačných cestách aplikované na konkrétnych liečivách.

Finálne hodnotenie predmetu Farmaceutická chémia (1): 50–47 bodov (hodnotenie „A“), 46–44 bodov („B“), 43–39 bodov („C“), 38–35 bodov („D“), 34–30 bodov („E“), menej ako 30 bodov („FX“; neprospel).

Minimálne požiadavky pre úspešné absolvovanie záverečného hodnotenia (skúšky) z predmetu Farmaceutická chémia (1) sú teda takéto: 60% (vrátane) z maximálneho bodového hodnotenia.

Váha priebežného / záverečného hodnotenia: 0 / 100. a) Seminára z predmetu Farmaceutická chémia (1). Úspešné absolvovanie seminárov, a teda možnosť zúčastniť sa na záverečnom hodnotení (skúšky) z predmetu Farmaceutická chémia (1), je podmienené úspešným absolvovaním dvoch priebežných hodnotení. Z každého priebežného hodnotenia je potrebné získať minimálne 60% a viac z maximálneho bodového hodnotenia. Získané (bodové) hodnotenie z priebežných hodnotení nie je explicitne zohľadnené v záverečnom hodnotení (skúške). b) Skúška z predmetu Farmaceutická chémia (1) - váha pri záverečnom hodnotení: 100%. Vyhodnotenie skúšky z predmetu Farmaceutická chémia (1) a pridelenie príslušných klasifikačných stupňov je uvedené v časti "Podmienky absolvovania predmetu". Exaktné bodové hodnotenie zo seminárov z predmetu "Farmaceutická chémia (1)" nie je zohľadnené v záverečnom hodnotení (skúške).

Výsledky vzdelávania:

Farmaceutická chémia (predmet Farmaceutická chémia (1)) je jednou z centrálnych vedeckých disciplín, ktorá premostňuje vedomosti základnej vedeckej biológie a klinické znalosti medicíny (analogicky s chémiou, ktorá je centrálnou vedeckou disciplínou medzi tradičnými biologickými a fyzikálnymi disciplínami). Projekcia liečiv môže byť fázovaná so zreteľom na dva aspekty, t.j. fundamentálne poznatky o: a) liečivách, receptoroch, interakciách liečivo–receptor; b) komplexných interakciách liečivo–receptor, ktoré sú využiteľné pre terapii ľudských ochorení. Farmaceutická chémia je interdisciplinárna; veľmi vhodne integruje poznatky z teoretickej chémie, organickej chémie, analytickej chémie, molekulovej biológie, farmakológie a biochémie do jedného celku. Farmaceutická chémia má však aj vlastnú zreteľnú líniu – projekcia a syntéza liečiv s komplexnou a precíznou charakterizáciou ich vlastností so zreteľom na i) štruktúrnú integritu liečiv (vo farmaceutickej, farmakodynamickej a farmakokinetickej fáze), ii) štruktúrne fragmenty (farmakofór, toxikofór, metabofór, biofór; vzájomne zameniteľné bioizostéry), iii) ich štruktúrne vlastnosti, iv) fyzikálno-chemické vlastnosti (rozpustnosť, povrchová aktivita, acidobázické a lipohydrofilné vlastnosti), v) tvarové vlastnosti (geometrické, konformačné, topologické, stérické), vi) stereochemické vlastnosti (optické izoméry, enantioméry, geometrické izoméry), vii) elektrónové vlastnosti. V kontexte týchto poznatkov sú komplexne skúmané vzťahy medzi chemickou štruktúrou a biologickou aktivitou (SAR-hodnotenie, QSAR-hodnotenie).

Dôkladné osvojenie si vedomostí, pochopenie a správne interpretovanie všetkých súvislostí, ktoré sú vysvetlené v rámci tohto predmetu, je mimoriadne dôležité pre (takmer) všetky oblasti farmaceutického štúdia.

Stručná osnova predmetu:

Sylabus prednášok

1. TÝŽDEŇ: Úvod do štúdia farmaceutickej chémie, definícia predmetu a jeho charakterizácia. Definície fundamentálnych termínov používaných vo farmaceutickej chémii (liečivo, liek, proliečivo, liečivu podobný, ligand, receptor, biodostupnosť, vzťahy štruktúra–aktivita (SAR), kvantitatívne hodnotenie vzťahov štruktúra–aktivita (QSAR), biotransformácia a pod.). Kritériá klasifikácie liečiv. Základné princípy vývoja a optimalizácie liečiva (vrátane niektorých stratégií tejto optimalizácie), niektoré požiadavky na „ideálne“ liečivo.

Liečivo a jeho osud v organizme (farmaceutické, farmakokinetické a farmakodynamické aspekty).

2. TÝŽDEŇ: Interakcie „ligand–biomakromolekula“, časť 1. Typy interakcií medzi ligandom a receptorom, definície základných termínov (bioaktívna zložka, farmakofór, metabofór, toxikofór a pod.), enzýmy, interakcie ligand–enzým, interakcie ligand–nukleová kyselina, ortostérické a alostérické interakcie, alostérické modulátory (príklady liečiv), interakcie z chemického pohľadu (interakcie súvisiace s rozpoznávaním molekulového cieľa, neväzbové interakcie, t.j. väzby vodíkovým mostíkom, iónové interakcie, van der Waalsove interakcie, interakcie CH– π , interakcie kation– π , hydrofóbne interakcie, interakcie založené na chelatačnej schopnosti kovov, väzby halogénu; všetko vysvetlené na konkrétnych liečivách z rôznych farmakodynamických skupín).

3. TÝŽDEŇ: Interakcie „ligand–biomakromolekula“, časť 2. Kovalentné interakcie, kovalentné väzby, porovnanie pôsobenia nekovalentných, nereverzibilne kovalentných a reverzibilne kovalentných inhibítorov, dizajn kovalentných liečiv – inhibítorov, možné benefity a riziká spojené s používaním kovalentných inhibítorov, mechanizmus vytvorenia kovalentnej väzby medzi ligandom a cieľovým miestom (vysvetlené na konkrétnych liečivách z rôznych farmakodynamických skupín), typy reaktívnych funkčných skupín (nereverzibilné kovalentné inhibítory, reverzibilné kovalentné inhibítory), v praxi používané kovalentné inhibítory, kovalentné inhibítory v klinickom skúšaní (všetko vysvetlené na konkrétnych liečivách z rôznych farmakodynamických skupín).

4. TÝŽDEŇ: Proliečivá, definícia základných termínov, koncepcia a účel dizajnu proliečiv, klasifikačné kritériá, optimalizácia biodostupnosti (všetko vysvetlené na konkrétnych liečivách z rôznych farmakodynamických skupín), výhody proliečiv s optimalizovanými farmakokinetickými vlastnosťami. Niektoré nedávno schválené proliečivá.

Stereochemické aspekty vývoja liečiv, definície fundamentálnych termínov (konštitúcia, konfigurácia, konformácia, chiralita, torzné uhly, izomérie a pod.), dôležitosť stereochemických vlastností liečive pre ich biologický účinok (konkrétne príklady liečiv z rôznych farmakodynamických skupín).

Hybridné molekuly. Vlastnosti „ideálnej“ hybridnej molekuly. Stratégie dizajnu hybridných zlúčenín (konkrétne príklady hybridných liečiv z rôznych farmakodynamických skupín), niektoré hybridné molekuly používané v klinickej praxi, naznačenie vzťahov štruktúra–aktivita v niektorých farmakodynamických skupinách.

5. TÝŽDEŇ: Celkové anestetiká. Sedatíva, hypnotiká. Antiepileptiká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

6. TÝŽDEŇ: Psychofarmaká, časť 1. – Psycholeptiká. Neuroleptiká. Anxiolytiká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

7. TÝŽDEŇ: Psychofarmaká, časť 2. – Psychoanaleptiká. Antidepresíva. Psychostimulanciá. Nootropiká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

Psychofarmaká, časť 3. – Psychodysleptiká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

8. TÝŽDEŇ: Antiparkinsoniká. Antivomitiká. Antiemetiká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

9. TÝŽDEŇ: Analgetiká – Anodyná. Analgetiká – Antipyretiká. Antitusiká. Antimigreniká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

10. TÝŽDEŇ: Nesteroidné antiflogistiká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

11. TÝŽDEŇ: Lokálne anestetiká. Myorelaxanciá (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

Upevnenie vedomostí z predchádzajúcich prednášok.

12. TÝŽDEŇ: Adrenergiká. Anobeziká. Antiadrenergiká. Antidysrytmiká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

13. TÝŽDEŇ: Parasympatomimetiká. Parasympatolytiká. Spazmolytiká. Histamín, hypohistaminiká a antihistaminiká (Definície, systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

Sylabus seminárov

1.–2. TÝŽDEŇ: Fyzikálno-chemické vlastnosti liečiv. Solubilita – zvýšenie alebo zníženie rozpustnosti liečiv vo vode a lipidoch. Lipohydrofilné vlastnosti liečiv, parametre charakterizujúce lipofilitu. Acidobázické vlastnosti liečiv, parametre vyjadrujúce aciditu/bázicitu. Adsorpcia na pohyblivom a tuhom fázovom rozhraní. Povrchová aktivita liečiv. Micelárne vlastnosti liečiv.

3.–4. TÝŽDEŇ: Biotransformácia liečiv. Fázy biotransformácie a ich význam (vysvetlené na liečivách z rôznych farmakodynamických skupín).

5.–6. TÝŽDEŇ: Vitamíny rozpustné vo vode alebo v tukoch (Definície, základné funkcie vitamínov, chemické štruktúry vybraných vitamínov, mechanizmy pôsobenia vitamínov, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

7.–8. TÝŽDEŇ: Hormóny, časť 1. Hormóny odvodené od aminokyselín, hormóny peptidové a proteohormóny – hormóny hypotalamu, hormóny hypofýzy, hormóny placenty, hormóny vaječnikov, hormóny štítnej žľazy, antityreoidálne zlúčeniny – tyreostatiká, hormóny príštitných teliesok, hormóny pankreasu, tkanivové hormóny (Definície, základné funkcie, chemické štruktúry vybraných hormónov, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

Eikozanoidy (Prostacyklíny, tromboxány, prostaglandíny, dihydroxyleukotriény, peptidoleukotriény, lipoxíny).

Perorálne antidiabetiká (Definície, liečivá - systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenie vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

Farmakoterapia osteoporózy (Definície, liečivá – systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných liečiv, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

9.–10. TÝŽDEŇ: Hormóny, časť 2. Steroidné hormóny – Sexuálne hormóny a ich regulátory, hormóny kôry nadobličiek (Definície, liečivá – systematické chemické rozdelenie, chemické štruktúry vybraných hormónov, mechanizmy pôsobenia, hodnotenia vzťahov štruktúra–aktivita, biotransformácia).

11.–12. TÝŽDEŇ: Farmaceutická chémia pomocných látok.

Upevnenie vedomostí z predchádzajúcich seminárov.

Odporúčaná literatúra:

- Prednášky z predmetu Farmaceutická chémia (1)
Beale, J. M., & Block, J. H. (2011). Wilson and Gisvold's Textbook of Organic Medicinal and Pharmaceutical Chemistry. 12. Vyd. Wolters Kluwer Health (Lippincott Williams & Wilkins), Philadelphia, USA, 1022 s.
Doležal, M. a kol. (2014). Farmaceutická chemie liečiv pôsobiacich na centrální nervový systém. Praha, Karolinum, ČR, 188 s.
Doležal, M. a kol. (2016). Farmaceutická chemie liečiv pôsobiacich na autonómny nervový systém. Praha, Karolinum, ČR, 134 s.
Chackalamannil, S., Rotella, D., Ward, S. (2017). Comprehensive Medicinal Chemistry III, 3. Vyd. Elsevier, Amsterdam, Holandsko, 4536 s.
Malík, I. (2022). Farmaceutická chémia protivírusových a vybraných protinádorových liečiv, 1. Vyd. Vydavateľstvo Univerzity Komenského v Bratislave, Bratislava, SR, 468 s.
Patrick, G. L. (2017). An Introduction to Medicinal Chemistry. 6. Vyd. Oxford University Press, New York, USA, 832 s.
Pearson, P. G., & Wienkers, L. C. (2019). Handbook of Drug Metabolism. 3. Vyd. (Drugs and the Pharmaceutical Sciences). CRC Press, New York, USA, 616 s.
Remko, M. (2019). Základy medicínskej a farmaceutickej chémie, 3. Vyd. Remedika, Bratislava, SR, 480 s.
Roche, V. F., Zito, S. V., Lemke, T. L., & Williams, D. A. (2019). Foye's Principles of Medicinal Chemistry, 8. Vyd. Wolters Kluwer Health Adis (ESP), Baltimore, USA, 1168 s.
Silverman, R. B., & Holladay, M. W. (2015). The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action. 3. Vyd. Elsevier, Waltham, USA, 521 s.

Jazyk, ktorého znalosť je potrebná na absolvovanie predmetu:

Slovenský jazyk, český jazyk, anglický jazyk

Poznámky:

Hodnotenie predmetov

Celkový počet hodnotených študentov: 3417

A	ABS	B	C	D	E	FX
14,98	0,03	16,86	24,61	17,15	19,46	6,91

Vyučujúci: doc. Mgr. Fils Andriamainty, PhD., doc. PharmDr. Ivan Malík, PhD., PharmDr. Vladimír Garaj, PhD., Ing. Stanislava Šoralová, PhD., doc. PharmDr. Miroslava Sýkorová, PhD., Ing. Jaroslav Galba, PhD., PharmDr. Iva Kapustíková, PhD., PharmDr. Matej Maruniak, PhD., PharmDr. Eva Salanci, PhD., PharmDr. Lenka Stopková, PhD., Mgr. Róbert Šandrik, PhD.

Dátum poslednej zmeny: 16.10.2023

Schválil: doc. Mgr. Fils Andriamainty, PhD.