



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΤΜΗΜΑ ΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΗΣ

ΣΧΟΛΗ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΥΓΕΙΑΣ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΥΓΕΙΑΣ
ΤΜΗΜΑ ΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΗΣ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ



ΠΕΡΙΓΡΑΦΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ: **ΒΙΟΑΝΟΡΓΑΝΗ ΧΗΜΕΙΑ – ΜΟΡΙΑΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ**
ΚΩΔΙΚΟΣ: **PHA-C11-NEW**

ΒΙΟΑΝΟΡΓΑΝΗ ΧΗΜΕΙΑ – ΜΟΡΙΑΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ
ΠΕΡΙΓΡΑΦΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

1. ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΥΓΕΙΑΣ		
ΤΜΗΜΑ	ΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΗΣ		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	PHA-C11-NEW	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	5ο
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	ΒΙΟΑΝΟΡΓΑΝΗ ΧΗΜΕΙΑ – ΜΟΡΙΑΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ		ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ
Διαλέξεις		3	6
Εργαστηριακές Ασκήσεις		3	
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Επιστημονικής Περιοχής		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	-		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	Ελληνική		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	Όχι		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://www.pharmacy.upatras.gr/images/DS/PHA-C11-NEW.pdf		

2. ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα
Το συγκεκριμένο μάθημα αποσκοπεί στην απόκτηση γνώσεων και κατανόησης θεμάτων τα οποία εμπίπτουν: 1. στο πεδίο των βιολογικών μορίων, εν δυνάμει φαρμακευτικών στόχων, των οποίων η λειτουργία βασίζεται σε μεταλλικά κέντρα και η κατανόηση της δράσης τους ή ρύθμισής αυτής με φαρμακευτικές ενώσεις προϋποθέτει την γνώση των αρχών της βιοανόργανης χημείας, δηλαδή των ενώσεων συναρμογής σε βιολογικά συστήματα, 2. στο πεδίο των φαρμακευτικών ενώσεων οι οποίες περιέχουν μεταλλικά ιόντα («ανόργανα φάρμακα»), 3. στο πεδίο της κατανόησης εξελικτικών σχέσεων μεταξύ βιομορίων, της αναζήτησης, εξόρυξης, ανάλυσης, σύγκρισης, οργάνωσης με βάση συγκεκριμένα χαρακτηριστικά και οπτικοποίησης βιολογικών δεδομένων καθώς και δομικών πληροφοριών, 4. στην προσομοίωση δομών βιομορίων με βιολογικό και φαρμακευτικό ενδιαφέρον καθώς και στην ανάλυση των δομικών τους χαρακτηριστικών , και 5. στην αξιοποίηση αναλυτικών μεθόδων, όπως η Φασματοσκοπία NMR στην χρήση τους για την διαμορφωτική μελέτη βιομορίων και στο σχεδιασμό βιοδραστικών ενώσεων.

Επιπλέον, μέσω των προσφερόμενων εργαστηριακών ασκήσεων του μαθήματος, αναμένεται η ανάπτυξη των δεξιοτήτων των ασκούμενων φοιτητών στην χρήση εργαλείων βιοπληροφορικής, της ανάλυσης και της κατανόησης των εξαγόμενων πληροφοριών, καθώς και της κατανόησης των σχέσεων δομής-δραστικότητας των βιολογικών μορίων τα οποία αποτελούν πιθανούς ή γνωστούς φαρμακευτικούς στόχους.

Το συγκεκριμένο μάθημα, αξιοποιεί και επεκτείνει τις γνώσεις που έχουν αποκτήσει οι φοιτητές μέσω των μαθημάτων Γενικής & Ανόργανης Χημείας, Βιοχημείας και Ενόργανης Ανάλυσης

Γενικές Ικανότητες

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών
- Αυτόνομη εργασία
- Ομαδική εργασία
- Εργασία σε διεθνές περιβάλλον
- Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον
- Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών
- Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

3. ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Βιοανόργανη Χημεία [Ενότητα 1]

(α) Σύμπλοκες Ενώσεις: Θεωρία, ονοματολογία και ισομέρεια

(β) Βασικές Αρχές Βιοανόργανης Χημείας

(γ) Μεταλλοβιομόρια: Δομή και Λειτουργία

- Μεταλλοένζυμα Zn (Καρβοξυπεπτιδάσες, Καρβονικές Ανυδράσες, Αλκοολικές Αφυδρογονάσες, Αμινοπεπτιδάσες, κ.λ.π.)
- Αιμοπρωτεΐνες και Χαλκοπρωτεΐνες
- Σιδηρο-θειο-πρωτεΐνες
- Μεταγραφικοί Παράγοντες (Zinc Fingers)

(δ) Βιομιμητική Χημεία (Artificial Enzymes)

(ε) Μεταλλικά Σύμπλοκα στη Φαρμακευτική

Μοριακή Προσομοίωση & Σχεδιασμός Βιοδραστικών Μορίων [Ενότητα 2]

(α) Βιομοριακή προσομοίωση και δομική Βιοπληροφορική. Οι Βασικοί άξονες για την κατανόηση του ΔΟΜΙΚΟΥ πλαισίου των βιολογικών φαινομένων.

(β) Βάσεις δεδομένων & αναζήτηση/εξόρυξη δεδομένων βιολογικής σημασίας (βιβλιογραφικά δεδομένα, ακολουθίες & δομές πρωτεϊνών, εργαλεία βιοπληροφορικής για την αποτίμηση των φυσικοχημικών ιδιοτήτων των πρωτεϊνών, κλπ.)

(γ) Βασικά στοιχεία δομών πρωτεϊνών, DNA και RNA, τάξεις δομών και κατάταξη, αναδίπλωση και ευκαμψία βιομορίων.

(δ) Πρωτεϊνική αρχιτεκτονική, πρόβλεψη (συγκριτική προσομοίωση, threading, ab initio), μηχανική, σχεδιασμός απεικόνιση και ανάλυση πρωτεϊνικών δομών, πειραματικές μέθοδοι δομικής μελέτης βιομακρομορίων και Φασματοσκοπία NMR. προσομοίωση σύμπλεξης/πρόσδεσης βιομορίων και υποστρωμάτων και σχεδιασμός βιοδραστικών μορίων

(ε) Σύγκριση δομικών μοντέλων και ανάλυση ποιότητας δομών βιομορίων (Ramachandran plots, στερεοχημεία, κ.λ.π.).

Εργαστηριακές Ασκήσεις:

Άσκηση 1: Βάσεις Δεδομένων (SwissProt, PubMed κ.λ.π.). Αναζήτηση Δομικών Μοντέλων στην Βάση Δεδομένων PDB.

Άσκηση 2: Αναζήτηση και Αντιστοίχιση Ακολουθιών μέσω του εργαλείου Blast και του λογισμικού ClustalW.

Άσκηση 3: Πρωτεϊνική Αρχιτεκτονική, και Πλατφόρμες Πρόβλεψης & Προσομοίωσης Δευτεροταγούς και Τριτοταγούς Δομής (Πλατφόρμες/Διακομιστές NPS@ και 3D-PSSM).

Άσκηση 4: Απεικόνιση Μοντέλων της βάσης PDB με το λογισμικό MOLMOL (Απεικόνιση, ανάλυση, εξαγωγή δομικών πληροφοριών, κ.λ.π.).

Άσκηση 5: Διαμόρφωση Βιομορίων μέσω Φασματοσκοπίας NMR.

Άσκηση 6: Σύγκριση Τρισδιάστατων Μοντέλων και Ανάλυση Ποιότητας Δομών Βιομορίων (λογισμικό PROCHECK: Ramachandran plots, στερεοχημεία, ανάλυση στοιχείων δευτεροταγούς δομής, κ.λ.π.).

Άσκηση 7: Πρόβλεψη Διαμόρφωσης Πρωτεϊνών - Προσομοίωση Δομής Βιομορίων μέσω Ομολογίας.

Άσκηση 8: Προσομοίωση σύμπλεξης/πρόσδεσης βιομορίων και υποστρωμάτων & Σχεδιασμός βιοδραστικών μορίων (σχεδιασμός κατευθυνόμενος από την δομή του βιομορίου-στόχου, αναζήτηση ενώσεων μέσα από εικονικές χημικές βιβλιοθήκες, κ.λπ.).

4. ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ	Πρόσωπο με πρόσωπο
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ	Χρήση eclass στην επικοινωνία με τους φοιτητές και στην οργάνωση των εργασιών τους Χρήση ΤΠΕ στη διδασκαλία
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	Δραστηριότητα Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου Διαλέξεις 39 Εργαστηριακή Άσκηση 39 Μη καθοδηγούμενη μελέτη 72 Σύνολο Μαθήματος (25 ώρες φόρτου εργασίας ανά πιστωτική μονάδα) 150
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ	Η Μέθοδος αξιολόγησης είναι οι Τελικές Γραπτές Εξετάσεις και η επίδοση στις εργαστηριακές ασκήσεις. Οι Τελικές Γραπτές Εξετάσεις συμπεριλαμβάνουν θέματα Ανάπτυξης (Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης) και θέματα Πολλαπλής Επιλογής. Προφορική Εξέταση και αξιολόγηση των φοιτητών πραγματοποιείται στα πλαίσια των εργαστηριακών ασκήσεων. Επιπλέον, προβλέπεται σε ορισμένες περιπτώσεις και η Εργαστηριακή Εργασία. Ναι, τα κριτήρια είναι γνωστά. Αναφέρονται στις διαλέξεις και κατά την διάρκεια των Εργαστηριακών Ασκήσεων

5. ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία :

- 1) Εισαγωγή στη Δομή Πρωτεϊνών, Carl Branden & John Tooze (Eds), Garland Science, NY, USA, Taylor & Francis Group, 2006 Ακαδημαϊκές Εκδόσεις Ι. Μπάσδρα & ΣΙΑ Ο.Ε.
- 2) Βιοανόργανη Χημεία, Δ. Π. Κερίσογλου, Γ. Ψωμάς, Εκδόσεις Ζήτη Πελαγία και Σία Ο.Ε, 2010, Θεσσαλονίκη
- 3) Εργαστηριακές Ασκήσεις «Ασκήσεις Μοριακής Προσομοίωσης», Γ. Σπυρούλιας, Πάτρα, 2008