



# Integratieopdracht in silico Geneesmiddelontwikkeling

Course

2022-2023

#### Toegangseisen

Studenten wordt aangeraden om de colleges van de vakken Ontwerp & Synthese en Farmacologie te volgen voordat ze aan deze opdracht deelnemen. Daarnaast is de kennis die wordt opgedaan bij academische vaardigheden in jaar 1 en aan het begin van jaar 2 waardevol voor de verslaglegging en presentatie van deze opdracht.

# Beschrijving

In deze integratieopdracht pas je de theoretische kennis die je over *in silico* geneesmiddelonderzoek bij de vakken Ontwerp & Synthese en Farmacologie hebt opgedaan, toe.

Bij *drug discovery*, aan het begin van het geneesmiddelontwikkelingsproces, spelen data analyse technieken als cheminformatica en bioinformatica een belangrijke rol bij het beschrijven van receptorstructuren en het kwantificeren van interacties tussen receptor en (geneesmiddel)moleculen. Gedurende dit deel van de opdracht ga je zelf aan de slag met een aantal geneesmiddelen om uit te zoeken wat hun eigenschappen zijn en hoe ze werken. Daarnaast bestudeer je de 3-dimensionale structuur van een drug target om te begrijpen hoe een geneesmiddel interactie aangaat met het target.

Aan het eind van de klinische fase van geneesmiddelonderzoek kunnen farmacologische modellen worden gebruikt om door middel van simulaties van farmacokinetische (PK) en farmacodynamische (PD) profielen de respons en variabiliteit in respons van patiënten op geneesmiddelen te bestuderen. Daarnaast kunnen populatiemodellen worden gebruikt om de ideale farmacologische eigenschappen van een nieuw

geneesmiddel 2.0 vast te stellen, zodat gedefinieerd kan worden op welke eigenschappen in vroege fases van het geneesmiddelonderzoek geselecteeerd moet worden.

Tijdens dit blok oefen je ook je academische vaardigheden, met name hoe je het werk van anderen kritisch kunt evalueren en van feedback kunt voorzien en hoe je zowel schriftelijk als door middel van presentaties je eigen onderzoeksresultaten effectief kunt communiceren.

#### Leerdoelen

Tijdens dit vak pas je kennis toe die je hebt opgedaan met betrekking tot het ontwerpen en uitvoeren van *in silico* geneesmiddel onderzoek. Hierbij komen cheminformatica, bioinformatica en populatiemodelling aan bod. Aan het eind van dit vak...

- ... weet je hoe je farmacologische/fysisch chemische/structurele data van meerdere geneesmiddelen kunt evalueren.
- ... weet je hoe je de "drug likeness" van een ligand aan de hand van de structuur kunt evalueren.
- ... kun je de waarde van een kristalstructuur voor het medicijnonderzoek beschrijven
- ... kun je de algemene structuurkenmerken en belangrijke ligand-receptor interacties herkennen in een kristalstructuur met ligand.
- ... kun je simulaties uitvoeren met populatie PKPD modellen en de uitkomsten interpreteren.
- ... kun je optimale farmacologische eigenschappen van nieuwe geneesmiddelen definiëren op basis van simulaties met PKPD modellen.
- ... heb je geoefend met het samenwerken met meerdere studenten aan een project en met de verslaglegging van jullie gezamenlijke onderzoek.
- ... heb je geoefend met het effectief communiceren van onderzoeksresultaten in zowel een schriftelijk verslag als een presentatie.
- ... heb je geoefend met het correct refereren naar werk van anderen in schriftelijke verslaglegging

#### Rooster

In MyTimetable (na login) kun je alle vak- en opleidingsroosters vinden, waarmee je het grootste deel van je rooster (zalen en tijden) kunt samenstellen. Onderwijsactiviteiten waarvoor je je via MyStudymap hebt ingeschreven, worden automatisch in je rooster getoond. Daarnaast kun je MyTimetable gemakkelijk koppelen aan een agenda-app op je telefoon en worden roosterwijzigingen automatisch in je agenda doorgevoerd; bovendien ontvang je desgewenst per e-mail een notificatie van de wijziging (stel in onder 'Instellingen' na login).

Vragen over MyTimeTable? Bekijk de video, lees de instructie of neem contact op met de ISSC helpdesk

#### LET OP:

In MyTimeTable kunnen we op dit moment niet álle roosterinformatie weergeven, dus **CHECK ALTIJD** ÓÓK

• *het overzichtsrooster op de Brightspace module 'Bachelor Bio-Farmaceutische Wetenschappen'* voor een compact overzicht van de opbouw van ieder studiejaar, incl. timing van herkansingen en studiegerelateerde activiteiten zoals voorlichting, symposia, etc.. **ÉN** 

• *het detailrooster op de Brightspace module van ieder vak (na inschrijving)*, 2-3 weken voor een vak begint. Jouw persoonlijke detailrooster kan nl. afwijken bijv. vanwege opsplitsen in groepen, tussentijdse deadlines, gastdocenten, etc.. **Het detailrooster van het vak op Brightspace is leidend**.

#### Onderwijsvorm

Onderzoeksopdracht op basis van *in silico* experimenten, individuele peer-to-peer review opdracht, individuele verslaglegging en presentatie in groepen.

# Toetsing en weging

Dit vak wordt beoordeeld op basis van individuele verslagen en een groepspresentatie. Aanwezigheid bij de groepspresentaties is verplicht.

# Literatuurlijst

Er hoeven voor dit vak geen boeken te worden aangeschaft.

# Inschrijven

Om deel te kunnen nemen aan dit vak is *inschrijving in uSis verplicht*, gebruik daarvoor My StudyMap.

#### LET OP:

- Omdat het vak uit een praktische oefening bestaat en de groepsindeling is gekoppeld aan practicum Ontwerp & Synthese, sluit de inschrijving *28 dagen vóór de eerste activiteit = het introductiecollege van de Integratieopdracht*.
- *Schrijf je alleen in voor de onderdelen die je daadwerkelijk gaat volgen*, ook uitschrijven als je niet deelneemt is verplicht.

#### **Contact**

Mevr. M. van der Kuijl, MSc en Dhr. Dr. G.J.P. van Westen.

# Opmerkingen

Niet van toepassing.