

LVA 163.114
Medizinische Chemie
VO (2.0)
M. Mihovilovich & U. Jordis

Medicinal Chemistry Textbooks

Version SS 2010

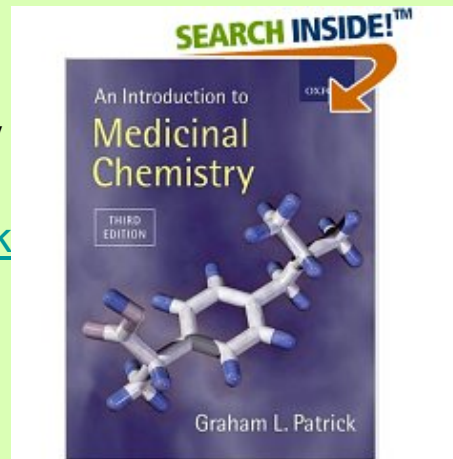
Terminkalender

- 27.5. Lehrbücher, Molecular Conceptor, How to read Med.Chem. Literature
- 3.6. Fronleichnam (entfällt)
- 10.6. Dr. Edtmayr / Novartis
- 17.6. Exkursion Sanochemia: upscaling, Wirkstoffsynthese in der Praxis
- 23.6.
- 30.6.

2

Textbooks 1a

- **An Introduction to Medicinal Chemistry (Taschenbuch)** von [Graham L. Patrick](#)
- **Highly recommended!**



3

Textbooks 1a

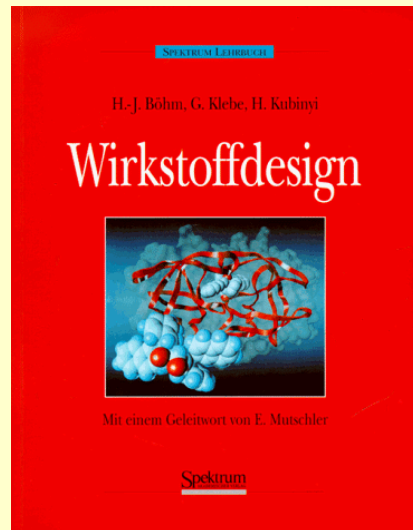
- **Medicinal Chemistry** -By D. Sriram and P. Yogeswari {Dorling Kinderseley Pvt.Ltd.}
- **Highly recommended – copy in Library!**

4

Textbooks 1b

- H.-J. Böhm, G. Klebe, H. Kubinyi
Wirkstoffdesign
Spektrum 1996

Chemiebibliothek TU vorhanden



Textbooks 2

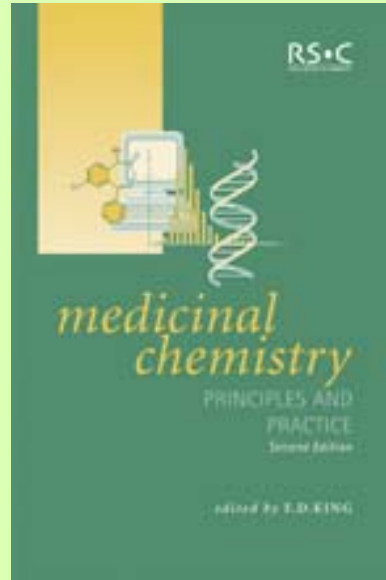
- **Medizinische Chemie. Targets und Arzneistoffe**
von [Dieter Steinhilber](#) ,
[Manfred Schubert-Zsilavecz](#) , [Hermann J. Roth](#)



Textbooks 2

- F.D. King., Ed.
**Medicinal
Chemistry Principles
and Practice** 2nd Ed.,

The Royal Society of
Chemistry 2002



Textbooks 3

- **Silverman, Richard B. : Medizinische
Chemie für Organiker, Biochemiker und
pharmazeutische Chemiker / Richard B.
Silverman. Hrsg. der Übers. Joachim K.
Seydel. Übers. von Marion Gurrath und
Gerhard Müller . - Weinheim [u.a.] : VCH-
Verl.-Ges. , 1995 . - XIV, 440**

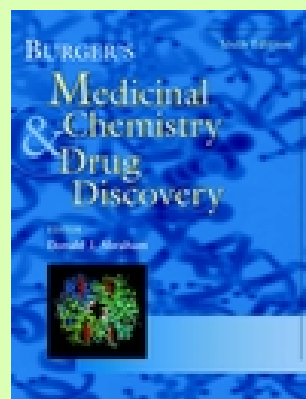
Textbooks 4

- S. Grabley u. R. Thiericke (Eds.) **Drug Discovery from Nature** Springer 2000
- J.L. McGuire, Ed. **Pharmaceuticals**
Classes, Therapeutic Agents, Areas of Application
Wiley-VCH 2000
 - Vol. 1 Introduction, Cardiovascular Drugs
 - Vol. 2 Neuropharmaceuticals, Gastrointestinal
Drugs, Respiratory Tract
 - Vol. 3 Antiinfectives, Endocrine and
Metabolic Drugs
 - Vol. 4 Miscellaneous Drugs, Related
Technology

9

Textbooks 5

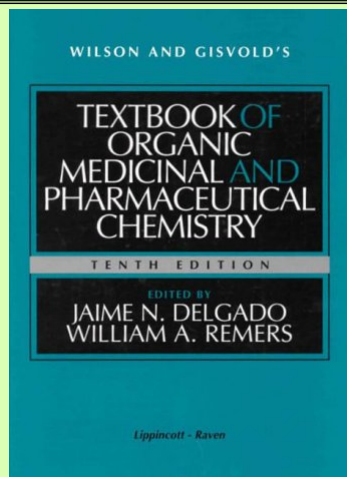
- **Burger's Medicinal Chemistry and Drug Discovery, 6 Volume Set**
Donald J. Abraham
ISBN: 0-471-37032-0
Hardcover
5568 pages
February 2003



10

Textbooks 6

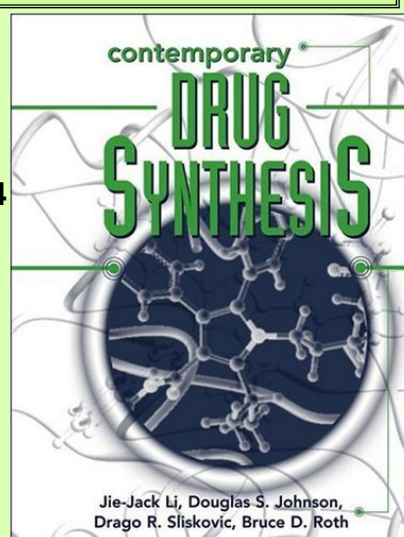
- **Textbook of Organic Medicinal and Pharmaceutical Chemistry. Tenth Edition.** Edited by Jaime N. Delgado and William A. Remers. Lippincott-Raven, Philadelphia, PA. 1998.



11

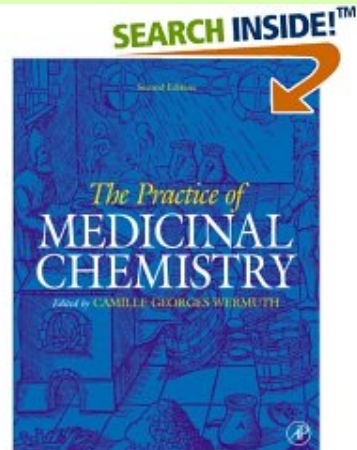
Textbooks 7

- **Contemporary Drug Synthesis.** Jie-Jack Li, Douglas Johnson, Drago R. Sliskovic, Bruce D. Roth 2004 John Wiley
- (TU-Chemiebibliothek)



Textbooks

- The Practice of Medicinal Chemistry, Second Edition
by [Camille Georges Wermuth](#) (Editor)
- Chemiebibliothek
852.661 II



13

Medicinal Chemistry 8

- Annual Reports in Medicinal Chemistry

ANNUAL
REPORTS IN
MEDICINAL
CHEMISTRY
Volume 41

Sponsored by the Division of Medicinal Chemistry
of the American Chemical Society

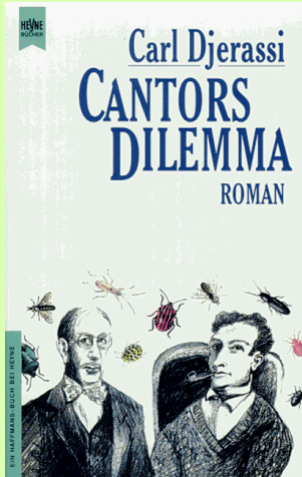
Editor-in-Chief: **ANTHONY WOOD**

PHARMACEUTICAL RESEARCH & DEVELOPMENT
SANDHILL LABORATORIES
SUNNYVALE, CALIFORNIA



14

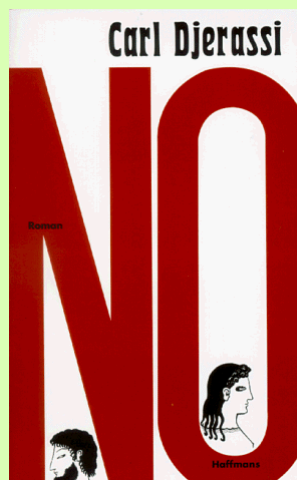
Bücher von Djerassi



- **Cantors Dilemma.** Roman. von Carl Djerassi
Heyne, Mchn. (1993)
Der erfolgreiche Chemiker Carl Djerassi, Miterfinder der Anti-Baby-Pille, legt seinen ersten Roman vor, in dem er den Werdegang des Nobelpreisträgers Cantor schildert. Den Gipfel seiner wissenschaftlichen Karriere erreicht der Biochemiker allerdings auf nicht ganz legale Weise. 'Eine brillante Geschichte über Moral und Politik der Wissenschaft von heute, aufregend, bewegend und hinreißend erzählt'

15

Bücher von Djerassi 2

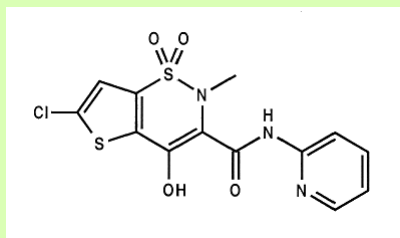


- *NO erzählt die aufregende Geschichte einer Forschung, von der ersten Idee bis zur Zielsetzung, vom ersten Laborexperiment bis zum Selbstversuch, von der Geldbeschaffung bis schließlich zum fertigen Präparat in der Apotheke: Männern kann geholfen werden! Männer, die nicht mehr konnten, können wieder. DANK NO.*
Denn NO bedeutet nicht 'Nein', sondern ist die chemische Formel für Stickoxid - einerseits als Industriegas ein globaler Schadstoff, andererseits ein biologischer Botenstoff, der bei einer überwältigenden Fülle von Vorgängen im menschlichen Körper unerlässlich ist, so auch bei der männlichen Erektion.

16

Das Millionen Schilling Molekül

XEFO
Prof. D. Binder

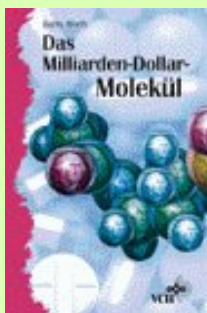


Lornoxicam ist ein nichtsteroidales Antirheumatikum (NSAR) aus der Gruppe der Oxicame, das zur symptomatischen Kurzzeitbehandlung von Schmerzen und Entzündungen bei Arthrose (Osteoarthritis) und zur Behandlung von rheumatoider Arthritis zugelassen wurde. Es unterscheidet sich vom Tenoxicam nur durch einen Chlor-substituenten am C6-Atom. Wie andere NSAR hemmt Lornoxicam die Prosta-glandin-Synthese über eine Hemmung der Cyclooxygenase.

Von den eingeführten Oxicamen unterscheidet es sich durch eine relativ kurze Halbwertszeit von 3 bis 5 Stunden. Ob das Vorteile auf die Verträglichkeit hat, muß bezweifelt werden, denn in klinischen Vergleichstudien zeigte Lornoxicam ein gleiches Nebenwirkungspotential wie Diclofenac. Häufigste Nebenwirkungen von Lornoxicam sind wie bei allen NSAR gastrointestinale Störungen.

17


Das Milliarden- Dollar - Molekül



- **Das Milliarden- Dollar - Molekül.** von [Barry Werth](#)
- Wie wird die Suche nach neuen wirksamen Medikamenten finanziert? Welche Motive lenken das Verhalten der beteiligten Unternehmen und Personen? Diesen Fragen ist der Journalist Barry Werth vor Ort nachgegangen. Vier Jahre lang konnte er Einsicht in alle Geschäftsaktivitäten der jungen amerikanischen "Venture-capital-Firma" Vertex nehmen. Seine authentische Story über die Jagd der "Drug Designer" nach dem perfekten Medikament gewährt dem Leser faszinierende Einblicke in die wissenschaftlichen, finanziellen und menschlichen Hintergründe der Milliarden verschlingenden Arzneimittelforschung.

18

Software 2: PASS



**Prediction of
Activity
Spectra for
Substances**

Version 1.703 *Professional*

Copyright © 1998-2003
V. Poroikov, D. Filimonov & Associates
<http://www.ibmli.msk.su/PASS/>

19

Software 3: ADME Boxes



ADME Boxes 1.0

Installed Add-ins:

Aqueous Solubility 1.0

Ionization 1.0

Toxicity LD50 (Intraperitoneal, Mouse) 1.0

Copyright © 2001-2002 Advanced Pharma Algorithms, Inc.

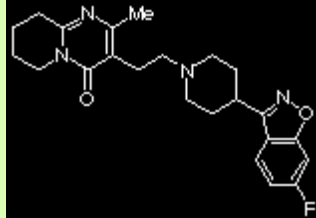
All rights reserved.

www.ap-algorithms.com

e-mail: info@ap-algorithms.com

20

Some Recent Blockbuster Drugs

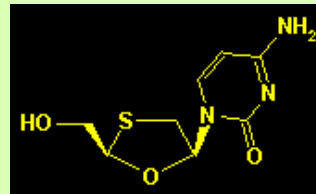


RISPERDAL (risperidone)

- Serotonin-dopamine antagonist (atypical antipsychotic) for schizophrenia
- 1997 sales: \$850 million

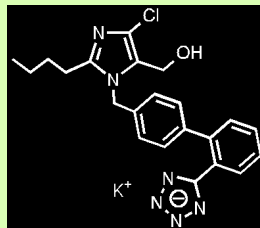
EPIVIR (lamivudine, 3TC)

- Reverse transcriptase inhibitor for antiviral therapy (HBV, HIV)
- 1997 sales: \$490 million



23

Some Recent Blockbuster Drugs

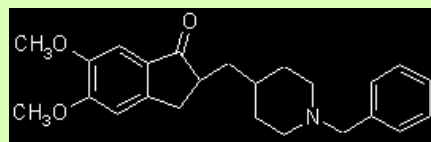


COZAAR (losartan)

- AT-II receptor antagonist for hypertonia
- 1997 sales \$605 million

ARICEPT (donepezil)

- Acetylcholinesterase inhibitor for Alzheimer's disease
- Projected sales until end-98 \$400 million



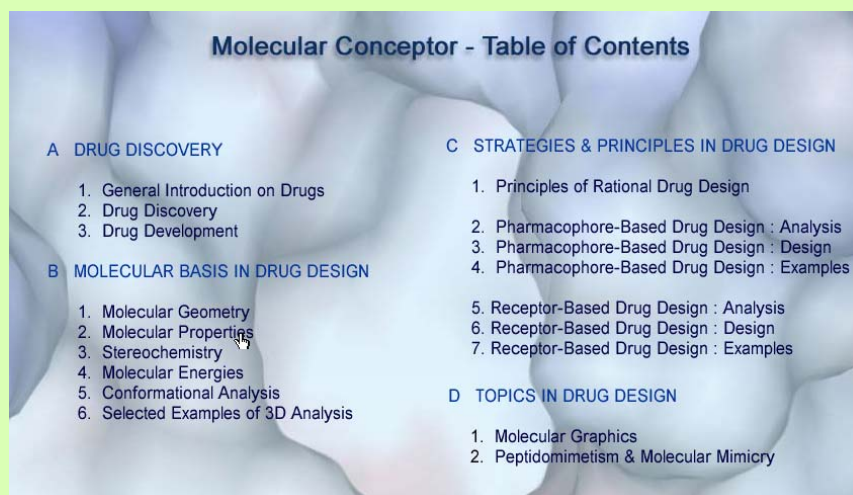
24

How Is A Drug Named?

- Systematic chemical name, CAS code
- Research Code: [originator]-[identifier]
- U.S. Adopted Name (USAN)
- International Non-Proprietary Name (INN)
- Trademark name

25

Molecular Conceptor



Molecular Conceptor - Table of Contents

A DRUG DISCOVERY <ol style="list-style-type: none">1. General Introduction on Drugs2. Drug Discovery3. Drug Development	C STRATEGIES & PRINCIPLES IN DRUG DESIGN <ol style="list-style-type: none">1. Principles of Rational Drug Design2. Pharmacophore-Based Drug Design : Analysis3. Pharmacophore-Based Drug Design : Design4. Pharmacophore-Based Drug Design : Examples5. Receptor-Based Drug Design : Analysis6. Receptor-Based Drug Design : Design7. Receptor-Based Drug Design : Examples
B MOLECULAR BASIS IN DRUG DESIGN <ol style="list-style-type: none">1. Molecular Geometry2. Molecular Properties3. Stereochemistry4. Molecular Energies5. Conformational Analysis6. Selected Examples of 3D Analysis	D TOPICS IN DRUG DESIGN <ol style="list-style-type: none">1. Molecular Graphics2. Peptidomimetism & Molecular Mimicry

- <http://www.molecular-conceptor.com/home.html>

26

Molecular Conceptor Installation

- local client must be installed by a user with administrative privileges.
-
- run
\\it2.ioc.tuwien.ac.at\campus\Molecular_conceptor\mc2_setup.exe
- from Setup Menu, chose CUSTOM INSTALLATION - NETWORK VERSION
- Check MOLECULAR CONCEPTOR (unckeck all other boxes) and click NEXT
- After Finishing Installation:
- copy \\it2\campus\Molecular_conceptor\nethasp.ini to mc2 program directory (e.g. the dir where mc2.exe is located)

27

Molecular Conceptor Inhalt

28

