

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	<b>UNIVERSITATEA DE MEDICINA SI FARMACIE "VICTOR BABEȘ" TIMIȘOARA</b>
1.2 Facultatea	<b>FACULTATEA DE FARMACIE</b>
1.3 Departamentul	<b>I FARMACIE</b>
1.4 Domeniul de studii de licență <sup>1)</sup>	<b>SĂNĂTATE</b>
1.5 Ciclul de studii <sup>2)</sup>	<b>LICENȚĂ</b>
1.6 Programul de studii/ Calificarea	<b>FARMACIE/FARMACIST</b>

### 2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	<b>PROIECTAREA MEDICAMENTULUI</b>							
2.2 Titularul activităților de curs	Prof. univ.dr. Ledeți Ionuț-Valentin							
2.3 Titularul activităților de laborator	-							
2.4 Anul de studiu	<b>III</b>	2.5 Semestrul	<b>1</b>	2.6 Tipul de evaluare	<b>Colocviu</b>	2.7 Regimul disciplinei	Conținut <sup>3)</sup>	<b>DS</b>
							Obligativitate <sup>3)</sup>	<b>DO</b>

### 3. Timpul total estimat (ore pe semestru al activităților didactice)

3.1 Număr de ore pe săptămână	<b>1</b>	3.2 din care: curs	<b>1</b>	3.3 laborator	-
3.4 Total ore din planul de învățământ	<b>14</b>	3.5 din care: curs	<b>14</b>	3.6 laborator	-
Distribuția fondului de timp					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					22
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminarii/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					-
Tutoriat					-
Examinări					1
Alte activități					-
3.7 Total ore studiu individual	<b>36</b>				
3.8 Total ore pe semestru	<b>50</b>				
3.9 Numărul de credite <sup>5)</sup>	<b>2</b>				

### 4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	Chimie fizică; Chimie organică
4.2 de competențe	-

### 5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 de desfășurare a cursului	Videoproiector, calculator, tablă
5.2 de desfășurare a seminarului/ laboratorului/ proiectului	-

### 6. Competențe specifice acumulate

<b>Competențe Profesionale</b>	1. Însușirea unor noțiuni referitoare la cercetarea medicamentului în faza preclinică, de identificare a unor structuri moleculare cu potențial de a deveni medicamente; 2. Înțelegerea conceptului QSAR : Relații cantitative structură-activitate; 3. Completarea cunoștințelor privind cercetarea medicamentului (faza de descoperire și proiectarea rațională).
<b>Competențe transversale</b>	1. Capacitatea de a stabili legături între noțiunile de la diverse discipline fundamentale și de specialitate și faza de descoperire a medicamentului; 2. Capacitatea de a opera cu pachete de programe de mecanică moleculară și de mecanică cuantică pentru obținerea unor structuri moleculare tridimensionale; 3. Capacitatea de a opera cu un pachet de programe de grafică moleculară, în vederea realizării analizei 3D a structurii unor proteine și a interacției acestora cu diverși liganzi.

### 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din competențele specifice acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	Asigurarea unei pregătiri teoretice și dezvoltarea unor abilități practice referitoare la cercetarea medicamentului într-o fază timpurie (faza preclinică) și de identificare a unor structuri moleculare cu potențial de a deveni substanțe de uz farmaceutic/ biomedical.
---------------------------------------	---

7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Acumularea noțiunilor de bază necesare înțelegerii rațiunii proiectării computerizate a medicamentului;</li> <li>- Familiarizarea studentului farmacist cu operarea unor pachete de programe specifice domeniului "drug design";</li> <li>- Dezvoltarea abilităților de a construi și interpreta un model QSAR, de a cunoaște modalitățile de identificare corectă a interacțiunilor fizice favorabile și defavorabile între medicament și receptor.</li> </ul>
---------------------------	--

## 8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Număr de ore	Observații
1. PARADIGMA CENTRALĂ A QSAR (I): Definiția, semnificația și importanța conceptului QSAR; Noțiunea de activitate biologică la nivel molecular și termodinamic; Posibilitatea de cuantificare numerică a activității biologice.	prezentare orală + multimedia	1 oră	
2. PARADIGMA CENTRALĂ A QSAR (II): Etapele principale ale procesului de introducere pe piață a unei substanțe active noi; Costurile asociate introducerii pe piață a unei substanțe active noi; Rațiunea proiectării computerizate a medicamentului.		1 oră	
3. PARADIGMA CENTRALĂ A QSAR (III): Strategiile aplicate în proiectarea rațională a unor noi medicamente în cazul cunoașterii sau nu a structurii tridimensionale a receptorului țintă; Paradigma de bază a QSAR; Poziția acestei paradigme în proiectarea rațională a medicamentului.		1 oră	
4. CUANTIFICAREA NUMERICĂ A ACTIVITĂȚII BIOLOGICE: Definirea noțiunii de serie congeneră; Principalele metode de măsurare numerică a activității biologice prin metode biofizice, respectiv biochimice; Metode de echilibru termodinamic, respectiv cinetice de măsurare numerică a activității biologice.		1 oră	
5. CUANTIFICAREA NUMERICĂ A STRUCTURII MOLECULARE: Descriptori moleculari structurali clasici și moderni utilizați în cuantificarea numerică a structurii moleculare; Modalități de calcul a descriptorilor moleculari structurali cu ajutorul computerului; Posibilități de determinare a descriptorilor moleculari ai structurii prin măsurători directe fizico-chimice, prin măsurători de echilibru termodinamic, respectiv cinetice.		1 oră	
6. CUANTIFICAREA NUMERICĂ A ACTIVITĂȚII BIOLOGICE ȘI A STRUCTURII MOLECULARE – aplicații pe computer: Prezentarea și utilizarea unui pachet de programe de mecanică moleculară și de mecanică cuantică pentru obținerea unor structuri moleculare tridimensionale realiste (aplicație pe calculator la câteva molecule de medicament); Prezentarea și utilizarea unui pachet de programe de calculare a descriptorilor structurali numerici dintr-o structură moleculară tridimensională oarecare (aplicație pe calculator – calculul unor descriptori pentru moleculele alese).		1 oră	
7. STABILIREA MODELULUI QSAR PRIN ANALIZĂ REGRESIONALĂ (I): Noțiuni referitoare la modelarea QSAR prin regresie liniară multiparametrică; Regresia liniară multiparametrică; Modalități de calcul a coeficienților regresionali specifici.		1 oră	

8. STABILIREA MODELULUI QSAR PRIN ANALIZĂ REGRESIONALĂ (II): Reguli de testare a calității statistice a modelului QSAR; Reguli de interpretare a modelului QSAR; Principii de realizare corectă a analizei statistice a modelelor regresionale; Predictivitatea modelelor regresionale.		1 oră	
9. STABILIREA MODELULUI QSAR PRIN ANALIZĂ REGRESIONALĂ (III) aplicații pe computer: Prezentarea și principii de operare a unui pachet de programe pentru analiză regresională; Analiza regresională a unei serii de analgezici analogi ai capsaicinei (aplicații pe computer); Interpretarea corectă și relevanța modelului QSAR obținut.		1 oră	
10. STABILIREA MODELULUI QSAR PRIN ANALIZĂ REGRESIONALĂ (IV) – aplicații pe computer: Analiza regresională a unei serii de inhibitori ai alcooldehidrogenazei, derivați pirazolici; Interpretarea corectă a modelului QSAR rezultat; Relevanța modelului QSAR obținut.		1 oră	
11. STRUCTURA BIOMACROMOLECULELOR (I): Noțiuni referitoare la structura tridimensională a proteinelor relevante în modelele QSAR; Structura primară, secundară, terțiară și cuaternară a proteinelor (amino acizii, cele 4 nivele de structură, alfa - helix, foi beta – pliate, situs de legare ligand); Structura bazelor azotate, a nucleozidelor, a nucleotidelor a ADN și ARN (acizii nucleici: baze azotate, nucleozide, nucleotide, dublu – helix ADN, structura ARN).		1 oră	
12. STRUCTURA BIOMACROMOLECULELOR (II): Noțiuni de interes în modelele QSAR, referitoare la structura tridimensională a membranelor biologice, ținte terapeutice; Structura membranei, moleculele „cărămizi”, structura dublu strat, proteinele din membrană; Analiza 3D a structurii proteinelor; Operarea corectă a unui pachet de programe pentru vizualizarea structurii proteinelor (aplicație pe calculator).		1 oră	
13. STRUCTURA BIOMACROMOLECULELOR (III): Prezentarea unui pachet de programe de grafică moleculară, în vederea realizării analizei 3D a structurii unor proteine și interacția acestora cu un ligand; Realizarea corectă a unei aplicații pe calculator utilizând o proteină din baza de date Brookhaven Protein Data Bank cocrystalizată cu un ligand; Modalități de identificare a interacțiunilor fizice favorabile și defavorabile între medicament și receptor; Identificarea corectă a principalelor tipuri de interacțiuni ligand - receptor din modelul studiat.		1 oră	
14. EVALUARE		1 oră	
<b>Bibliografie obligatorie:</b> 1. Curs de Proiectarea Medicamentului - suport în format electronic disponibil la <a href="https://moodle.umft.ro/">https://moodle.umft.ro/</a> 2. Kurunczi L., „Proiectarea medicamentelor asistată de computer. QSAR. Relații cantitative structură – activitate.” Ed. Eurobit, Timișoara, 1998  <b>Bibliografie facultativă:</b> 1. Hansch C., Leo A., „Exploring QSAR. Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology.” ACS Professional Reference Book, ACS, Washington, 1995			

2. Leach A. R., Gillet V. J., „An Introduction to Chemoinformatics”, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003 3. Chiriac A., Ciubotariu D., Simon Z., Editori, „Relații cantitative structură chimică – activitate biologică (QSAR). Metoda MTD.”, Editura Mirton, Timișoara, 1996			
8.2 Seminar/ Laborator /stagiu/ proiect	Metode de predare-învățare	Număr de ore	Observații
Nu este cazul			
<b>Bibliografie obligatorie:</b>			
-			

**9. Coroborarea conținuturilor disciplinei cu așteptările reprezentanților comunităților epistemice, asociațiilor profesionale și angajatori reprezentativi din domeniul aferent programului**

Cursul de Proiectarea Medicamentului va asigura studenților farmaciști înțelegerea și acumularea unor noțiuni legate de strategiile aplicate în descoperirea rațională a unor noi medicamente. Aceste cunoștințe le vor oferi posibilitatea de a evolua în echipe pluridisciplinare și de a conștientiza faptul că cercetarea înseamnă aplicarea corectă și creatoare a cunoștințelor acumulate.

**10. Evaluare**

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	<i>Cunoștințe pentru nota 5:</i> Reies din aplicarea grilei de corectură. Vizează: -Înțelegerea și deprinderea noțiunilor de bază cu care operează proiectarea medicamentului  <i>Cunoștințe pentru nota 10:</i> Reies din aplicarea grilei de corectură. Vizează: -Aplicarea cunoștințelor dobândite în înțelegerea și explicarea proceselor și fenomenelor relevante în domeniul farmaceutic. -Capacitatea de a propune un fir logic în obținerea unui model QSAR adecvat	Test grilă, cu 50 întrebări, dintre care un procent maxim de 35% de tip complement simplu.	100 %
10.5 Activitate pe parcurs			
10.6 Standard minim de performanță			
- promovarea colocviului (nota 5). - îndeplinirea tuturor obligațiilor contractuale, conform contractului de studii			

Data completării 28.09.2022	Semnătura titularului de curs Prof.univ.dr. Ionuț-Valentin Ledeți	Semnătura titularului de laborator/stagiu -
Semnătura șefului de disciplină Prof.univ.dr. Ionuț-Valentin Ledeți		
Data avizării în departament	Semnătura directorului de departament Prof.univ.dr. Laura Sbârcea	