

FICHE DE DISCIPLINE

1. Faits sur le programme

1.1. Établissement d'enseignement supérieur	UNIVERSITÉ DE MÉDECINE ET DE PHARMACIE « VICTOR BABEȘ » TIMISOARA
1.2. Faculté	FACULTÉ DE PHARMACIE
1.3. Département	II
1.4. Domaine d'études	Licence
1.5. Cycle d'études	Licence
1.6. Programme d'études / Qualification	Pharmacie / Pharmacien

2. Données sur la discipline

2.1. Nom de la discipline	PRINCIPES DE STRUCTURE DE CONCEPTION ET AMARRAGE MOLÉCULAIRE						
2.2. Le titulaire des activités du cours	Vacant/Conf. Dr. Mioc Marius						
2.3. Le titre des activités de laboratoire	Vacant/Conf. Dr. Mioc Marius						
2.4. Année d'études	II	2.5. Semestre	I	2.6. Type d'évaluation	Colloque	2.7. Régime disciplinaire	Contenu ³⁾ DD
						Obligation ³⁾	DA

3. Temps total estimé (heures par semestre d'activités d'enseignement)

3.1. Nombre d'heures par semaine	2	3.2 dont: cours	1	3.3. séminaire	
3.4. Nombre total d'heures du programme	28	3.5 dont: cours	14	3.6. séminaire	
Distribution du fonds de temps					Heures
Étude par manuel, support de cours, bibliographie et notes					10
Documentation supplémentaire dans la bibliothèque, sur les plateformes électroniques spécialisées et sur le terrain					5
Préparation de séminaires / laboratoires/ projets, sujets, rapports, portfolios et essais					
Tutorat					-
Examen					2
Autres activités					-
3.7. Nombre total d'heures d'auto-apprentissage	22				
3.8. Nombre total d'heures par semestre	50				
3.9 Nombre de crédits ⁵⁾	2				

4. Conditions préalables (le cas échéant)

4.1.cursus	- connaissances en chimie organique, thermodynamique, informatique
4.2.de compétences	- capacité à analyser, synthétiser, extrapoler les informations acquises dans les disciplines spécialisées

5. Conditions (le cas échéant)

5.1.du cours	• - vidéoprojecteur, PC
5.2.de la conduite du séminaire / laboratoire / projet	• -vidéoprojecteur, PC, logiciel spécifique pour l'amarrage moléculaire, la visualisation de structures protéiques 3D et la génération de structures chimiques 2D et 3D

6. Acquis des compétences spécifiques

Compétences Professionnel	1. Connaissance des aspects concernant le rôle de l'amarrage moléculaire et du criblage virtuel dans la recherche de nouveaux candidats à potentiel médicamenteux 2. Connaissance des outils nécessaires disponibles pour mettre en œuvre le flux de travail requis pour le filtrage virtuel 3. capacité de sélectionner des candidats moléculaires en fonction de l'interprétation des résultats de l'amarrage moléculaire 4. L' connaissance des implications dans le développement de nouvelles structures médicinales
---------------------------	--

Compétences transversales	1. capacité d'utiliser l'expertise dans de nouveaux contextes 2. la capacité d'identifier, d'analyser et de résoudre de nouveaux événements afin d'optimiser le processus de sélection de nouvelles molécules à potentiel pharmacologique 3. développer le rôle de spécialiste dans le domaine de la médecine 4. propre perfectionnement professionnel
---------------------------	---

7. Les objectifs de la discipline (en fonction des compétences spécifiques acquises)

7.1. L'objectif général de la discipline	Le cours fournit les informations de base sur le processus d'amarrage moléculaire utilisé dans la conception et le criblage virtuels. Il existe des façons présentées d'utiliser les différents programmes et plates-formes nécessaires pour mettre en œuvre chaque étape du flux de travail. Les façons d'utiliser les résultats dans le but de sélectionner de nouveaux composés ayant un potentiel pharmacologique sont également présentées.
7.2. Objectifs spécifiques	Le cours offre la possibilité d'accumuler les connaissances théoriques nécessaires à son propre développement professionnel, en particulier dans le domaine du développement de nouveaux médicaments.

8. Contenu

8.1. Cours	Méthodes d'enseignement	Nombre d'heures	Observations
1. Premiers pas avec l'amarrage moléculaire et le filtrage virtuel	- conférence, cours interactif	2	
2. Façons de représenter l'identité des composés chimiques. Paramètres 2D des composés chimiques.		2	
3. Ligands. Génération de structures moléculaires 2D et 3D. Optimisation des structures 3D.		2	
4. Protéines cibles. Traitement des protéines en tant que structures appropriées pour l'amarrage. Bases de données de jambes de force protéiques 3D.		2	
5. Principes de l'amarrage moléculaire rigide. Programmes d'amarrage moléculaire. Fonctions de score		2	
6. Notions générales sur l'interaction protéine-ligand		2	
7. Interprétation et représentation graphique des résultats.		2	

Bibliographie obligatoire :

- Adriano D. Andricopulo, Leonardo L. G. Ferreira, *Frontiers in Pharmacology, Chemoinformatics Approaches To Structure- and Ligand-based Drug Design*, 2019.
- Ayaz Mahmood Dar et Shafia Mir, *Journal of Analytical & Bioanalytical Techniques, Molecular Docking: Approaches, Types, Applications and Basic Challenges*, 2017
- Veronica Salmaso, Stefano Moro, *Frontiers in Pharmacology, Bridging Molecular Docking to Molecular Dynamics in Exploring Ligand-Protein Recognition Process: An Overview*, 2018.

Bibliographie facultative :

.

8.2 Séminaire/ Laboratoire/stage/ projet	Méthodes d'enseignement-apprentissage	Nombre d'heures	Observations
1.	Discussion interactive, travail individuel		
2.			
3.			
4.			
5.			
6.			
7.			
8.			
9.			
10.			
11.			
12.			

13.28			
Bibliographie obligatoire : 1. Adriano D. Andricopulo, Leonardo L. G. Ferreira, Frontiers in Pharmacology, Chemoinformatics Approaches To Structure- and Ligand-based Drug Design, 2019. 2. Ayaz Mahmood Dar et Shafia Mir, Journal of Analytical & Bioanalytical Techniques, Molecular Docking: Approaches, Types, Applications and Basic Challenges, 2017 3. Veronica Salmaso, Stefano Moro, Frontiers in Pharmacology, Bridging Molecular Docking to Molecular Dynamics in Exploring Ligand-Protein Recognition Process: An Overview, 2018. Bibliographie facultative : 1. 2.			

9. Corroboration du contenu de la discipline avec les attentes des représentants des communautés épistémiques, des associations professionnelles et des employeurs représentatifs dans le domaine lié au programme

Le cours fournit l'accumulation de connaissances spécialisées nécessaires pour un spécialiste dans le domaine de la médecine, afin d'optimiser l'acte professionnel utile dans le domaine de la recherche et du développement de nouvelles substances ayant un effet pharmacologique potentiel

10. Évaluation

Type d'activité	10.1. Critères d'évaluation	10.2. Méthodes d'évaluation	10.3. Pondération de la note finale
10.4. Cours	<i>Connaissances pour la note 5 :</i> - connaissance des aspects généraux concernant les principes de l'amarrage moléculaire, les moyens de représenter les ligands, les interactions ligand-protéine. <i>Connaissances pour la note 10 :</i> - connaissance de méthodes spécifiques de préparation de structures 3D de ligands et de protéines cibles - connaissance de l'interprétation graphique de l'interaction ligand-protéine - connaissance de l'interprétation des scores obtenus à la suite du processus d'amarrage moléculaire	Examen de questions à choix multiples	100%
10.5. Laborateur/Stage			
10.6. Norme de rendement minimale			
Acquérir les notions de base concernant les réactions métaboliques, des systèmes enzymatiques impliqués, des phénomènes d'induction et d'inhibition enzymatique, des facteurs qui interviennent dans le métabolisme du médicament, l'identification de diverses situations pouvant survenir dans des conditions de polythérapie.			

Date d'achèvement	Signature du titulaire du cours Conf. Dr Marius Mioc	Signature du titulaire du laboratoire/stage Conf. Dr Marius Mioc
Signature du chef de discipline Prof. univ. dr. Codruța Șoica		
Date d'approbation	Signature du directeur du département	

Remarque :

- 1) L'étude domeniul- l'une des variantes est choisie: Licență/ Master/ Doctorat (à compléter selon la nomenclature des domaines et des spécialisations / programmes d'études universitaires en vigueur);
- 2) Cycle d'étude - l'une des options suivantes est choisie: Licență/ Master / PhD;
- 3) Le régime disciplinaire (contenu) - l'une des variantes suivantes est choisie: **DF** (discipline fondamentale) / **DD** (discipline dans le domaine) / **DS** (discipline spécialisée) / **DC** (discipline complémentaire) - pour le niveau de licence; **DAP** (discipline d'approfondissement) / **DSI** (discipline de synthèse) / **DCA** (discipline de connaissances avancées) - pour le niveau de maîtrise;

- 4) Le régime disciplinaire (obligatoire) - *l'une des variantes est choisie*: **DI** (discipline obligatoire) / **DO** (discipline facultative) / **DFac**(matière facultative);
- 5) Un crédit équivaut à 25 à 30 heures d'études (activités d'enseignement et auto-apprentissage).
- 6) Pour les spécialisations et/ou disciplines dont les sujets se trouvent dans la bibliographie de résidence, cela devient obligatoire.