

# Curs opțional

## PROIECTAREA MEDICAMENTULUI

### Anul III, semestrul I

Asigurat de colectivul disciplinei de Chimie fizică  
-prof.univ.dr. Ionuț-Valentin Ledeti  
-asist.univ.dr. Sebastian-Claudiu Simu



Ce ne propunem să deprindem după acest curs?

- 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.
- Acumularea noțiunilor de bază necesare înțelegerii raționii proiectării computerizate a medicamentului;
- Familiarizarea studentului farmacist cu operarea unor pachete de programe specifice domeniului "drug design";
- 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.

## CUANTIFICAREA NUMERICĂ A ACTIVITĂȚII BIOLOGICE ȘI A STRUCTURII MOLECULARE

A Astfel, rezumând, măsurători experimentale adesea meticuloase și scumpe conduc la două tipuri de descriptori structurali, accesibili din baze de date

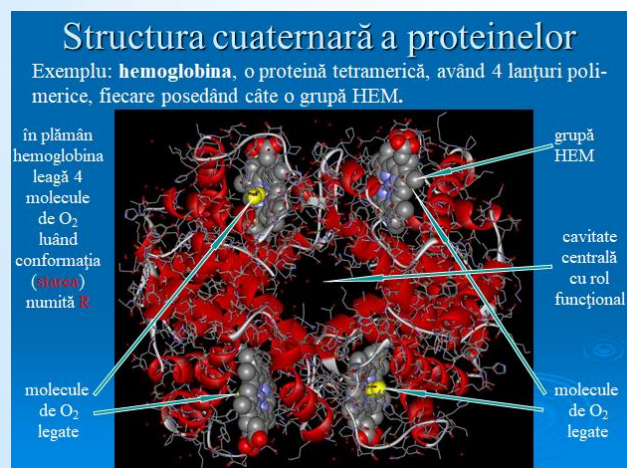
pentru molecule

pentru substituenți

	A	B	C	D	E	F	G
	Alcohol	$\mu$	MR	logP	$\sigma_m$	$\sigma_p$	$\sigma_l$
1	Me	1.66	8.2	-0.77	0	0	0
2	Et	1.71	13.1	-0.31	-0.07	-0.17	-0.04
3	Pr	1.65	17.8	0.25	-0.07	-0.15	-0.01
4	i-Pr	1.68	17.7	0.05	-0.04	-0.15	0.01
5	Bu	1.66	22.4	0.88	-0.06	-0.13	-0.01
6	i-Bu	1.71	22.4	0.76	-0.08	-0.16	-0.04
7					-0.1	-0.2	-0.07
8					-0.08	-0.12	-0.03
9					-0.07	-0.12	-0.03
10							

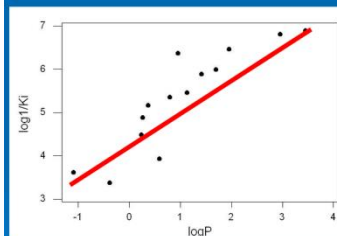
## STABILIREA MODELULUI QSAR PRIN ANALIZĂ REGRESIONALĂ

## STRUCTURA BIOMACROMOLECULELOR

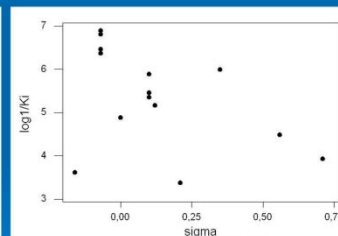


## Analiza grafică a datelor

### Interpretări preliminare



Hidrofobicitatea (logP) prezintă o posibilă corelație liniară



Nu există corelație între activitate și valorile  $\sigma_m$

### Bibliografie obligatorie:

- Curs de Proiectarea Medicamentului - suport în format electronic disponibil la <https://moodle.umft.ro/>
- Amjesh R., Principes fondamentaux du QSAR, Editura Editions Notre Savoir, 2021

### Bibliografie facultativă:

- Kunal Roy, Supratik Kar, Rudra Narayan Das, Understanding the Basics of QSAR for Applications in Pharmaceutical Sciences and Risk Assessment, Academic Press, 2015
- Kunal Roy (editor), Advances in QSAR Modeling - Applications in Pharmaceutical, Chemical, Food, Agricultural and Environmental Sciences, Springer Cham, 2018