

FIȘA DISCIPLINEI

Chimia medicamentelor; relația structură - activitate biologică,
anul universitar 2019-2020

1. Date despre program

1.1	Instituția de învățământ superior	Universitatea din Pitești
1.2	Facultatea	Științe, Educație fizică și Informatică
1.3	Departamentul	Științe ale naturii
1.4	Domeniul de studii	Chimie
1.5	Ciclul de studii	Licență
1.6	Programul de studiu / calificarea	Chimie medicală/ Chimist

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei												Chimia medicamentelor; relația structură - activitate biologică											
2.2 Titularul activităților de curs						Conf. univ. dr. Loredana Elena Vîjan																	
2.3 Titularul activităților de seminar / laborator						Conf. univ. dr. Loredana Elena Vîjan																	
2.4 Anul de studii		II		2.5 Semestrul		II		2.6 Tipul de evaluare		E		2.7 Regimul disciplinei		O/S									

3. Timpul total estimat

3.1	Număr de ore pe săptămână	3	3.2	din care curs	2	3.3	laborator	1
3.4	Total ore din planul de învăț.	42	3.5	din care curs	28	3.6	laborator	14
Distribuția fondului de timp alocat studiului individual								ore
Studiu după manual, suport de curs, bibliografie și notițe								24
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren								16
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii, eseuri								8
Tutorat								6
Examinări								4
Alte activități								
3.7	Total ore studiu individual			58				
3.8	Total ore pe semestru			100				
3.9	Număr de credite			4				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1	De curriculum	Cunoștințe acumulate la structura atomilor și moleculelor
4.2	De competențe	Identificarea, descrierea și utilizarea adecvată și în context a noțiunilor specifice chimiei

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1	De desfășurare a cursului	Sală dotată cu videoproiector și ecran
5.2	De desfășurare a laboratorului	Sală de lucrări practice, dotată cu echipament specific (aparatură și tehnică de calcul). Prezența obligatorie la lucrările practice.

6. Competențe specifice vizate

Competențe profesionale	C1. Operarea cu noțiuni de structură și reactivitate a compușilor chimici (PC=1/4) C2. Determinarea compoziției, structurii și proprietăților fizico-chimice a unor compuși chimici (PC=1/4) C5. Urmărirea, adaptarea și controlul proceselor chimice și fizico-chimice în laborator (PC=1/4)
Competențe transversale	CT1.Realizarea sarcinilor profesionale în mod eficient și responsabil cu respectarea legislației și deontologiei specifice domeniului sub asistență calificată (PC=1/4)

7. Obiectivele disciplinei

7.1 Obiectivul general al disciplinei	Dobândirea noțiunilor esențiale pentru înțelegerea fenomenelor care au loc în timpul interacției medicament – receptor biologic (țintă biologică). Formarea de abilități de lucru experimental, într-un climat optim, cu respectarea normelor de protecție a muncii.
7.2 Obiectivele specifice	<p><i>Obiective cognitive</i></p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Dezvoltarea unei baze științifice solide referitoare la concepte fundamentale privind sistemele biologice, ▪ Accesibilitate fundamentată științific la realizări contemporane importante în domeniul farmaceutic prin dobândirea noțiunilor de bază ale tehnicilor QSAR, ▪ Înțelegerea importanței interpretării corecte a rezultatelor obținute. <p><i>Obiective procedurale</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • Aplicarea corectă a principiilor și legilor chimiei în rezolvarea aplicațiilor practice, • Dezvoltarea capacității de investigare experimentală.

	<p><i>Obiective atitudinale</i></p> <ul style="list-style-type: none"> crearea deprinderilor practice în efectuarea unei lucrări de laborator, a unor calcule matematice specifice și de interpretare în mod corespunzător a rezultatelor obținute, identificarea surselor de informații pentru atingerea obiectivelor propuse, conștientizarea și cultivarea responsabilităților privind disciplina în efectuarea muncii din punct de vedere a corectitudinii, al respectării termenelor impuse, al respectului față de colegi, față de membrii echipei în care își desfășoară activitatea, cultivarea unei atitudini pozitive, de dialog cu spirit de inițiativă, în spiritul respectului față de profesia de chimist.
--	--

8. Conținuturi

8.1. Curs		Nr. ore	Metode de predare	Observații Resurse folosite		
1	Noțiuni introductive. Terminologie utilizată în proiectarea medicamentelor.	2	Prelegerea, conversația euristică, explicația, studiul de caz	Calculator Videoproiector Suport documentar		
2	Modelare chimică și interacția ligand (medicament) - receptor biologic. Similitudinea structurală și mimetismul molecular. Recunoașterea de către receptor a ligandului, identificarea grupărilor farmacofore.	2				
3	Mecanismul producerii activității biologice și afinitatea ligandului față de receptor. Antagonism.	2				
4-5	Modele fizico-chimice privind interacția ligand – receptor (teoria ocupării, vitezei de legare (agoniști, antagoniști), modelul operațional	4		Calculator Videoproiector Suport documentar		
6	Descoperirea medicamentului cu ajutorul calculatorului (CADD). Metode de docking (apropierea moleculelor și calculul energiilor de interacție în funcție de orientarea acestora)	2				
7-8	Metode 3D-QSAR și activitatea substanțelor medicamentoase. Principii generale ale QSAR. Cercetarea medicamentului.	4				
9	Metode de validare (crossvalidation) și valoarea predictivă a ecuațiilor Hansch. Ecuații de tip Hansch și Kubinyi.	2				
10	Modelare moleculară. Legile și etapele modelării moleculare.	2				
11	Descriptori topologici, electrostatici, termodinamici și cuantomoleculari (indici ai reactivității chimice, indici de formă moleculară).	2				
12	Suprafețe Connolly de hidrofobicitate și de acces al solventului.	2				
13-14	Analize QSAR privind activitatea sapoforică a edulcoranților, activitatea antivirală a unor medicamente, lipofilia substanțelor medicamentoase.	4				
Bibliografie						
* Note de curs în format electronic transmise studenților pe CD sau memory stick						
1. S. Avram, C. Buiu, C. Duda-Seiman, F. Borcan, D. Duda-Seiman, D. Mihailescu, Recent Trends on QSAR in the Pharmaceutical Perceptions, Bentham Science Publishers, 2012						
2. C. Duda-Seiman, S. Avram, D. Duda-Seiman, D. Mihailescu, C. Bolcu, D. Ciubotariu, R. Ciuca, Tehnici QSAR în proiectarea medicamentelor, Editura Mirton, Timișoara, 2010						
3. A. Chiriac, V. Ostafe, Z. Simon, Biochimie cuantică și interacții specifice (ediția 11), Editura Universității de Vest din Timișoara, Timișoara, 2008						
4. C.A. Cîrstea, R. Nuțiu, Proiectarea de noi medicamente, Editura Universității de Vest din Timișoara, Timișoara, 2006						
5. E. Amzoiu, C. Lepădatu, Modelare chimică și proiectarea medicamentului, Editura Sitech, Craiova, 2005						
6. C. Duda-Seiman, D. Duda-Seiman, R. Nuțiu, D. Ciubotariu, Relații cantitative structură chimică - activitate biologică (QSAR) la compușii anti-HIV, Editura Mirton, Timișoara, 2005						
7. G. Bratu, C. Mandravel, Chimie fizică, Editura Universității din Pitești, Pitești, 2003						
8. A. Chiriac, M. Mracec, T.I. Oprea, L. Kurunczi, Z. Simon, Quantum Biochemistry and Specific Interactions, Editura Mirton, Timișoara, 2002						
9. G. Bratu, Chimie fizică. Introducere în studiul structurii atomice și moleculare, Editura Universității din Pitești, Pitești, 2002						
10. Z. Simon, A. Chiriac, V. Ostafe, Accuracy in Molecular Biologic Recognition, Editura Mirton, Timișoara, 2000						
11. B. Cuoarencu, M. Timar, The Pharmacological Receptors, Gloria Publ. House, Cluj-Napoca, 1998						
12. A. Chiriac, D. Ciubotariu, Z. Simon, Relații cantitative structură chimică – activitate biologică (QSAR), Editura Mirton, Timișoara, 1996						
13. V.Em Sahini, M. Hillebrand, Chimie cuantică în exemple și aplicații, Editura Academiei Române, București, 1985						
14. Ș. Moldoveanu, A. Savin, Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de orbitali moleculari, Editura Academiei Române, București, 1980						
15. C. Ghirvu, Chimie fizică - Elemente de structură și reactivitate moleculară, Editura Institutului Politehnic Iași, 1979						
16. I.G. Murgulescu, Introducere în Chimia fizică - Structura și proprietățile moleculelor, vol. I.2, Editura Academiei Române, București, 1978						
17. I.G. Murgulescu, Introducere în Chimia fizică - Atomi, molecule, legătura chimică, vol. I. 1, Editura Academiei Române, București, 1976						
18. C. Ghirvu, Structură chimică, Universitatea "Al. I. Cuza" Iași, 1973						
8.2. Aplicații: Laborator		Nr. ore	Metode de predare	Observații Resurse folosite		
1	Protecția muncii în laborator. Noțiuni privind regulile de bună practică de laborator.	2	Exercițiul Studiul de	Calculator		

2	Structura atomilor în mecanica cuantică modernă – aplicații de calcul.	2	caz Explicația Învățarea prin descoperire Simularea Conversația	
3	Metoda Hartree-Fock a sistemelor multielectronice, determinantul Slater, orbitale atomice – aplicații de calcul.	2		
4	Molecula biatomică, proprietăți ale substanțelor medicamentoase în strânsă corelație cu designul unei metode de analiză, metoda Huckel – aplicații de calcul.	2		
5	Mecanica moleculară și metode semiempirice – aplicații pe calculator.	2		
6	Studiul cuantic al medicamentelor – aplicații pe calculator.	2		
7	Modelarea interacțiilor medicament – acid nucleic – aplicații pe calculator.	2		
Bibliografie				
1. C. Duda-Seiman, S. Avram, D. Duda-Seiman, D. Mihailescu, C. Bolcu, D. Ciubotariu, R. Ciuca, Tehnici QSAR în proiectarea medicamentelor, Editura Mirton, Timișoara, 2010				
2. C.A. Cîrstea, R. Nuțiu, Proiectarea de noi medicamente, Editura Universității de Vest din Timișoara, Timișoara, 2006				
3. C. Ghirvu, I. Humelnicu, Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea II – Structură moleculară, Editura Universității "Al.I. Cuza" Iași, 2005				
4. E. Amzoiu, C. Lepădatu, Modelare chimică și proiectarea medicamentului, Editura Sitech, Craiova, 2005				
5. C. Duda-Seiman, D. Duda-Seiman, R. Nuțiu, D. Ciubotariu, Relații cantitative structură chimică - activitate biologică (QSAR) la compuși anti-HIV, Editura Mirton, Timișoara, 2005				
6. G. Bratu, Chimie fizică, Lucrări practice, Editura Universității din Pitești, Pitești, 2005				
7. I. Humelnicu, I. Voicu, C. Ghirvu, M. Constantinescu, Chimie cuantică - Aplicații generale și probleme. Partea I - atomistică, Editura Universității Al.I. Cuza Iași, 2002				
8. A. Chiriac, D. Ciubotariu, Z. Simon, Relații cantitative structură chimică – activitate biologică (QSAR), Editura Mirton, Timișoara, 1996				
9. V.Em Sahini, M. Hillebrand, Chimie cuantică în exemple și aplicații, Editura Academiei Române, București, 1985				
10. Ș. Moldoveanu, A. Savin, Aplicații în chimie ale metodelor semiempirice de orbitali moleculari, Editura Academiei Române, București, 1980				
8.3. Tema de casă				
1	Se cere fiecărui student să elaboreze un referat cu temă impusă, în baza conținutului predat la curs, urmărindu-se învățarea studenților cu cerințele de redactare a lucrărilor de finalizare a studiilor, de scriere a unei referințe bibliografice, etc.			
Bibliografie: Note de curs în format electronic transmise studenților pe CD sau memory stick, literatura de specialitate				

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

- În vederea actualizării și îmbunătățirii conținutului disciplinei, cadrele didactice au participat la următoarele activități:
- întâlniri de lucru cu specialiști din producție și angajatori;
 - schimb de bune practici cu colegi din alte centre universitare;
 - participarea la conferințe, simpozioane și workshop-uri cu participarea unor specialiști din domeniu.

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Participarea activă la curs. Frecvența și relevanța intervențiilor orale. Capacitatea de a opera cu cunoștințele asimilate. Înțelegerea și aplicarea corectă a problematicii specifice. Capacitatea de analiză și sinteză.	Înregistrare săptămânală Evaluare finală prin probă scrisă	10% 50%
10.5 Laborator / Tema de casă	Capacitatea de a opera cu cunoștințele asimilate Conștiințiozitate, interes pentru studiu individual Frecvența și relevanța intervențiilor orale Capacitatea de a aplica cunoștințele în practică	Caiet de laborator Evaluare pe baza de referat	20% 20%
10.6 Standard minim de performanță	Participarea studentului la evaluarea finală este condiționată de îndeplinirea condiției: finalizarea integral a activităților cu prezență obligatorie (activitate de laborator, tema de casă) și obținerea notei minime de promovare (nota 5). Nota 5 la testul de evaluare finală. Promovarea studentului este strict condiționată de cunoașterea noțiunilor fundamentale necesare pentru înțelegerea interacțiilor <i>ligand</i> (medicament) – <i>receptor biologic</i> (acid nucleic) și a tehnicilor curente privind modelarea chimică și corelarea activității cu structura moleculară a acestora astfel încât în final studenții să fie capabili să modeleze singuri structurile chimice ale medicamentelor și să înțeleagă mai bine activitatea biologică a acestora.		

Data completării
15.09.2019

Titular de curs,
Conf. univ. dr. Loredana Elena Vijan

Titular de laborator,
Conf. univ. dr. Loredana Elena Vijan

Data aprobării în Consiliul departamentului,
17.09.2019

Director de departament,
Conf. univ. dr. Soare Liliana Cristina