

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie și Inginerie Chimică al Liniei Maghiare
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Master
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Tehnici moderne de sinteză în chimie (limba maghiară)

2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Design computațional al produselor farmaceutice (Cod disciplină: CMM6630)						
2.2 Titularul activităților de curs	Lect. dr. NAGY Levente Csaba						
2.3 Titularul activităților de seminar	Lect. dr. NAGY Levente Csaba						
2.4 Anul de studiu	II	2.5 Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	VP	2.7 Regimul disciplinei	DS

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

3.1 Număr de ore pe săptămână	4	Din care: 3.2 curs	2	3.3 seminar/laborator	2
3.4 Total ore din planul de învățământ	56	Din care: 3.5 curs	28	3.6 seminar/laborator	28
Distribuția fondului de timp:					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					20
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					20
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					20
Tutoriat					6
Examinări					3
Alte activități:					—
3.7 Total ore studiu individual	69				
3.8 Total ore pe semestru	125				
3.9 Numărul de credite	5				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1 de curriculum	• Nu este cazul
4.2 de competențe	• Nu este cazul

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1 De desfășurare a cursului	<ul style="list-style-type: none"> Sală cu proiector multimedia, ecran de proiecție, acces la internet. Studentii se prezintă la curs cu telefoanele mobile pe modul silențios.
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	<ul style="list-style-type: none"> Proiector multimedia, ecran de proiecție, acces la internet. Laborator dotat cu tehnică de calcul și software specific. Studentii lucrează fiecare pe câte o stație de lucru. Studentii se vor prezenta la laborator cu telefoanele mobile pe modul silențios. Nu se permite întârzierea.

6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> Definirea noțiunilor, conceptelor, teoriilor și modelelor de bază din domeniul drug design și utilizarea lor adecvată în comunicarea profesională. Utilizarea cunoștințelor aprofundate din domeniul chimiei pentru explicarea și interpretarea interacțiunilor enzimă–ligand. Analiza datelor și interpretarea corectă a rezultatelor teoretice obținute prin modelare. Identificarea și aplicarea conceptelor, metodelor și teoriilor pentru rezolvarea problemelor legate de designul produselor farmaceutice. Utilizarea instrumentelor specializate de calcul tehnico-științific în bioinformatica.
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> Executarea sarcinilor solicitate conform cerințelor precizate și în termenele impuse, cu respectarea normelor de etică profesională și de conduită morală, urmând un plan de lucru prestabilit și cu îndrumare calificată. Rezolvarea sarcinilor solicitate în concordanță cu obiectivele generale stabilite prin integrarea în cadrul unui grup de lucru și distribuirea de sarcini pentru nivelurile subordonate. Informarea și documentarea permanentă în domeniul său de activitate în limba maternă, limba română și într-o limbă de circulație internațională, cu utilizarea metodelor moderne de informare și comunicare

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> Să familiarizeze studenții cu noțiunile de bază, conceptele, teoriile și modelele de bază din domeniul drug design
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> Dobândirea cunoștințelor teoretice de bază din domeniul modelării moleculare cu privire la drug design. Dobândirea cunoștințelor referitoare la etapele ce trebuie parcurse în cazul unui studiu de andocare moleculară. Dobândirea cunoștințelor referitoare la metodele de screening virtual bazate pe structura liganzilor și structura proteinei.

8. Conținuturi

8.1 Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1 Prezentarea disciplinei. Introducere în drug design.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.2 Proprietăți moleculare. Enzime. Receptori. Farmacocinetică.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.3 Sisteme de coordonate. Grafică moleculară. Programe pentru vizualizarea, editarea și analiza structurilor moleculelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.4 Câmp de forță. Tipuri de interacțiuni între atomi. Tipuri de câmpuri de forță.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.5 Minimizarea energiei. Metode și algoritmi de minimizare. Echilibrarea sistemului. Suprafața de potențial.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.6 Dinamica moleculară. Parametrii esențiali pentru dinamica moleculară. Dinamica la temperatură constantă și variabilă.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.7 Librării și baze de date moleculare și structurale.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore

8.1.8 Andocare moleculară I. Introducere. Funcții scor. Energia de legătură.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.9 Andocare moleculară II. Andocare flexibilă și rigidă. Interpretarea rezultatelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.10 Mecanica moleculară. Analiza conformațională.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.11 Modelarea structurii 3D pe baza de omologie.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.12 Modele de farmacofori. Screening virtual.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.13 Metode QSAR/QSPR. 3D-QSAR.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
8.1.14 Soft pentru andocare moleculară și modelarea structurii 3D a proteinelor.	Prelegerea; Explicația; Conversația;	2 ore
Bibliografie 1. D.C. Young, Computational drug design: A guide for computational and medicinal chemists. Wiley, 2009. 2. G. Schneider, K.H. Baringhaus, H. Kubinyi, Molecular design: Concepts and applications, Wiley, 2008. 3. H.D. Holtje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, Molecular Modeling, 3rd Ed., Wiley, 2008. 4. A. Leach, Molecular modelling: Principles and applications, 2nd Ed., Pearson Prentice-Hall, 2001. 5. C.J. Cramer, Essentials of computational chemistry: Theories and models, 2nd, Ed., Wiley, 2004.		

8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1 Fișiere format structuri moleculare. Formatul SDF, PDB și SMILES. Programe de vizualizare și editare proteine.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.2 Analiza conformațională. Flexibilitate moleculară. Suprafața de potențial. Minimizarea energiei.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.3 Baza de date PDB. Structura cristalină a proteinelor. Analiza și corectarea structurilor cristaline. Factorul B.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.4 Formatul FASTA. Instrumente de alinierea secvențelor proteinelor. Identificare zimofori.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.5 Interacțiunea ligand-receptor. Diagrame de interacțiune 2D. Simulare QM/MM.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.6 Afinitatea de legare ligand-receptor. Andocarea moleculară rigidă. Funcții scor.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.7 Andocare flexibilă.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.8 Andocare indusă și andocare covalentă.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.9 Screening virtual bazat pe structura 3D a proteinei țintă.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.10 Screening virtual bazat pe structura liganzilor.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.11 Modele de farmacofori	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.12 Metode QSAR	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.13 Aplicațiile dinamicii moleculare în drug design.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
8.2.14 Modelarea structurii proteinei pe baza de omologie. Utilizare Swiss-Model.	Explicația, Conversația, Rezolvări de probleme	2 ore
Bibliografie		

1. D.C. Young, Computational drug design: A guide for computational and medicinal chemists. Wiley, 2009.
2. G. Schneider, K.H. Baringhaus, H. Kubinyi, Molecular design: Concepts and applications, Wiley, 2008.
3. H.D. Holtje, W. Sippl, D. Rognan, G. Folkers, Molecular Modeling, 3rd Ed., Wiley, 2008.
4. A. Leach, Molecular modelling: Principles and applications, 2nd Ed., Pearson Prentice-Hall, 2001.
5. C.J. Cramer, Essentials of computational chemistry: Theories and models, 2nd, Ed., Wiley, 2004.

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

- Prin însușirea conceptelor teoretico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina *Design computațional al produselor farmaceutice*, studenții dobândesc un bagaj de cunoștințe consistent, în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 1 – RNCIS

10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 Metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la curs	Două evaluări pe parcurs cu probă practică pe calculator. Accesul la examen este condiționat de prezența la laborator/seminar.	VP1: 40% VP2: 40%
	Rezolvarea corectă a problemelor		
10.5 Seminar/ laborator	Corectitudinea răspunsurilor – însușirea și înțelegerea corectă a problematicei tratate la seminar/laborator	Prezentarea problemelor date ca temă de casă Activitatea desfășurată la seminar	20%
	Calitatea referatelor pregătite. Activitatea desfășurată în laborator		
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none">• Nota 5 (cinci) la examen, conform baremului• Cunoașterea noțiunilor fundamentale; caracterizarea interacțiunii receptor-ligand.			

Data completării

5 aprilie 2024

Semnătura titularului de curs

Lect. dr. NAGY Levente Csaba



Semnătura titularului de seminar

Lect. dr. NAGY Levente Csaba



Data avizării în departament

14 aprilie 2024

Semnătura directorului de departament

Prof. Habil. Dr. Ing. Csaba PAIZS

