

FIȘA DISCIPLINEI

1. Date despre program

1.1. Instituția de învățământ superior	UNIVERSITATEA DE MEDICINA SI FARMACIE „VICTOR BABEȘ” TIMIȘOARA
1.2. Facultatea	FACULTATEA DE FARMACIE
1.3. Departamentul	II
1.4. Domeniul de studii	Licență
1.5. Ciclul de studii	Licență
1.6. Programul de studii/ Calificarea	Farmacie

2. Date despre disciplină

2.1. Denumirea disciplinei	PRINCIPII DE DESIGN SI ANDOCARE MOLECULARĂ							
2.2. Titularul activităților de curs	Vacant/Conf. Univ. Dr. Mioc Marius							
2.3. Titularul activităților de laborator	Vacant/Conf. Univ. Dr. Mioc Marius							
2.4. Anul de studiu	II	2.5. Semestrul	3	2.6. Tipul de evaluare	colocviu	2.7. Regimul disciplinei	Conținut ³⁾	DS
							Obligativitate ³⁾	DA

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

3.1. Număr de ore pe săptămână	1	3.2 din care: curs	1	3.3 laborator	
3.4. Total ore din planul de învățământ	28	3.5 din care: curs	14	3.6 laborator	
Distribuția fondului de timp					ore
Studiul după manual, suport de curs, bibliografie și notițe					10
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					5
Pregătire seminarii/ laboratoare/ proiecte, teme, referate, portofolii și eseuri					
Tutoriat					-
Examinări					2
Alte activități					-
3.7. Total ore studiu individual	22				
3.8. Total ore pe semestru	50				
3.9 Numărul de credite ⁵⁾	2				

4. Precondiții (acolo unde este cazul)

4.1. de curriculum	- cunoștințe de chimie organică, termodinamică, informatică
4.2. de competențe	- capacitate de analiză, de sinteză, de extrapolare a informațiilor dobândite la disciplinele de specialitate

5. Condiții (acolo unde este cazul)

5.1. de desfășurare a cursului	• - videoproiector, PC
5.2. de desfășurare a seminarului/ laboratorului/ proiectului	• - videoproiector, PC, programe specifice pentru andocare moleculară, vizualizare de structuri proteice 3D și de generarea de structuri chimice 2D și 3D

6. Competențe specifice acumulate

Competențe Profesionale	1. cunoașterea aspectelor privind rolul andocării moleculare și a screeningului virtual în cercetarea de noi candidați cu potențial de medicament 2. cunoașterea instrumentelor necesare disponibile, pentru implementarea fluxului de lucru necesar pentru screening virtual 3. capacitatea de a selecta candidați moleculari pe baza interpretării rezultatelor andocării moleculare 4. cunoașterea implicațiilor în dezvoltarea de noi structuri medicamentoase
Competențe transversale	1. capacitatea de a utiliza cunoștințele de specialitate în contexte noi 2. capacitatea de a identifica, analiza și rezolva evenimente noi, în scopul optimizării procesului de selecție de noi molecule cu potențial farmacologic 3. dezvoltarea rolului de specialist în domeniul medicamentului 4. dezvoltare profesională proprie

7. Obiectivele disciplinei (reieșind din competențele specifice acumulate)

7.1. Obiectivul general al disciplinei	Cursul oferă informațiile de bază despre procesul de andocare moleculară utilizată în design și screening virtual. Sunt prezentate modalități de utilizare a diverselor programe și platforme necesare pentru a implementa fiecare pas din fluxul de lucru. Sunt prezentate și modalități de utilizare a rezultatelor în scopul selecției de compuși noi cu potențial farmacologic.
7.2. Obiectivele specifice	Cursul oferă posibilitatea de acumulare a cunoștințelor teoretice necesare dezvoltării profesionale proprii, în special în domeniul de dezvoltare a noi produse medicamentoase.

8. Conținuturi

8.1. Curs	Metode de predare	Număr de ore	Observații
1. Noțiuni introductive despre andocare moleculară și screening virtual	- prelegere, curs interactiv	2	
2. Moduri de reprezentare a identității compusilor chimici. Parametrii 2D ai compusilor chimici.		2	
3. Liganzi. Generarea de structuri moleculare 2D și 3D. Optimizarea structurilor 3D.		2	
4. Proteine țintă. Prelucrarea proteinelor ca structuri adecvate pentru andocare. Baze de date cu structuri proteice 3D.		2	
5. Principii de andocare moleculară rigidă. Programe de andocare moleculară. Funcții de scor		2	
6. Noțiuni generale cu privire la interacțiunea proteină-ligand		2	
7. Interpretarea și reprezentarea grafică a rezultatelor.		2	

Bibliografie obligatorie:

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 and 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.

Bibliografie facultativă:

.

8.2 Seminar/ Laborator/stagiu/ proiect	Metode de predare-învățare	Număr de ore	Observații
1.	Discuție interactivă, muncă individuală		
2.			
3.			
4.			
5.			
6.			
7.			
8.			
9.			
10.			
11.			
12.			
13.			
14.28			

Bibliografie obligatorie:

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.

Bibliografie facultativă:

1.
2.
.....

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

Cursul asigură acumularea de cunoștințe de specialitate necesare unui specialist în domeniul cercetării medicamentelor, în vederea optimizării expertizei utile în domeniul cercetării și dezvoltării de noi compuși cu potențial terapeutic.

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> - cunoașterea aspectelor generale cu privire la principii de andocare moleculară, modalități de reprezentare a liganzilor, interacțiuni ligand-proteina. <i>Cunoștințe pentru nota 10:</i> - cunoașterea unor metode specifice de pregătirea a structurilor 3D a liganzilor și proteinelor tinta - cunoașterea modalității de interpretare grafică a interacțiunii ligand-proteină - cunoașterea modalității de interpretare a scorurilor obținute ca rezultat în urma procesului de andocare moleculară	Examen cu întrebări cu răspunsuri multiple	100%
10.5. Laborator/Stagiu	<i>Cunoștințe pentru nota 5:</i> Identificarea corectă a pașilor de bază în fluxul de lucru de andocare moleculară <i>Cunoștințe pentru nota 10:</i> Obținerea unui scor pentru molecula andocată; Identificarea principalelor tipuri de interacțiuni ligand-proteină	Activitate practică urmată de întrebări orale	
10.6. Standard minim de performanță			
Însușirea noțiunilor de bază cu privire la reacțiile de metabolizare, a sistemelor enzimactice implicate, a fenomenelor de inducție și inhibiție enzimatică, a factorilor ce intervin în metabolizarea medicamentului, identificarea diverselor situații ce pot apărea în condiții de politerapie.			

Data completării	Semnătura titularului de curs Conf. Univ. Dr. Marius Mioc	Semnătura titularului de laborator/stagiu Conf. Univ. Dr. Marius Mioc
Semnătura șefului de disciplină Prof. univ. dr. Codruța Șoica		
Data avizării în departament	Semnătura directorului de departament	

Notă:

- 1) Domeniul de studii - *se alege una din variantele:* Licență/ Masterat/ Doctorat (**se completează conform cu Nomenclatorul domeniilor și al specializărilor/ programelor de studii universitare în vigoare**) ;
- 2) Ciclul de studii - *se alege una din variantele:* Licență/ Master/ Doctorat;
- 3) Regimul disciplinei (conținut) - *se alege una din variantele:* **DF** (disciplină fundamentală)/ **DD** (disciplină din domeniu)/ **DS** (disciplină de specialitate)/ **DC** (disciplină complementară) - *pentru nivelul de licență;* **DAP** (disciplină de aprofundare)/ **DSI** (disciplină de sinteză)/ **DCA** (disciplină de cunoaștere avansată) - *pentru nivelul de masterat;*
- 4) Regimul disciplinei (obligativitate) - *se alege una din variantele:* **DI** (disciplină obligatorie)/ **DO** (disciplină opțională)/ **DFac** (disciplină facultativă);
- 5) Un credit este echivalent cu 25 – 30 de ore de studiu (activități didactice și studiu individual).

- ⁶⁾ Pentru specializările și/sau disciplinele a căror tematică se regăsește în bibliografia de rezidențiat, aceasta devine obligatorie.