

FICHE DE LA DISCIPLINE

1. Données sur le programme

1.1 Institution d'enseignement supérieur	UNIVERSITE DE MEDECINE ET PHARMACIE "VICTOR BABEȘ" TIMIȘOARA
1.2 Faculté	FACULTE DE PHARMACIE
1.3 Département	I PHARMACIE
1.4 Domaine d'études de licence ¹⁾	SANTE
1.5 Cycle d'études ²⁾	LICENCE
1.6 Programme d'études/ qualification	PHARMACIE EN LANGUE FRANCAISE/PHARMACIEN

2. Données sur la discipline

2.1 Nom de la discipline	PROJET DU MEDICAMENT							
2.2 Titulaire des activités de cours	Prof. univ. dr. Ionuț-Valentin Ledeti							
2.3 Titulaire des travaux pratiques	-							
2.4 Année d'études	III	2.5 Semestre	1	2.6 Type d'évaluation	Colloque	2.7 Régime de la discipline	Contenu ³⁾	DS
							Caractère ³⁾	DO

3. Temps total estimé (nombre d'heures par semestre des activités didactiques)

3.1 Nombre d'heures par semaine	1	3.2 desquelles: cours	1	3.3 travaux dirigés / travaux pratiques /stages	-
3.4 Total heures par semestre du plan d'enseignement	14	3.5 desquelles: cours	14	3.6 travaux dirigés / travaux pratiques /stages	-
Distribution du fonds de temps					Heures
Etude d'après livres, support de cours, bibliographie, notes					22
Documentation supplémentaires en bibliothèque, sur les sites électroniques de spécialité et sur terrain					14
Préparation travaux dirigés /travaux pratiques, travail individuel, comptes rendus, portfolios et essais					-
Tutoriel					-
Examinations					1
Autres activités					-
3.7 Total heures d'étude individuel	36				
3.8 Total heures par semestre	50				
3.9 Nombre de crédits ⁵⁾	2				

4. Préconditions (là où est le cas)

4.1 de curriculum	Chimie physique ; Chimie organique
4.2 des compétences	-

5. Conditions (là où est le cas)

5.1 de déroulement du cours	Vidéoprojecteur, ordinateur, tableau
5.2 de déroulement du séminaire / des travaux pratiques/ du projet	+

6. Compétences spécifiques accumulées

Compétences professionnelles	1. Apprendre des notions concernant la recherche du médicament dans la phase préclinique, d'identification d'une série de structures moléculaires ayant le potentiel de devenir des médicaments; 2. La compréhension du concepts du QSAR : Relations quantitatives structure-activité; 3. Compléter les connaissances sur la recherche du médicament (la phase de découverte et de projet rationnel).
Compétences transversales	1. La capacité d'établir des liaisons entre les notions de différentes disciplines fondamentales et de spécialité et la phase de la découverte du médicament; 2. La capacité d'utiliser des logiciels de mécanique moléculaire et de mécanique quantique afin d'obtenir des structures moléculaires tridimensionnelles; 3. La capacité d'utiliser un logiciel de graphique moléculaire, afin de réaliser l'analyse 3D de la structure de certaines protéines et de leur interaction avec différents ligands.

7. Objectifs de la discipline (résultant de la grille des compétences spécifiques accumulées)

7.1 Objectif général de la discipline	Assurer une base théorique solide et de développer des habilités pratiques sur la recherche du médicament, dans l'étape préclinique et d'identification d'une série de structures moléculaires ayant le potentiel de devenir des substances d'usage pharmaceutique /biomédical.
7.2 Objectifs spécifiques	<ul style="list-style-type: none"> - Accumuler des notions de base nécessaire à la compréhension de la ration du projet du médicament; - Familiarisation de l'étudiant pharmacien avec l'utilisation d'une série de logiciels spécifiques au domaine "drug design"; - Développement des habilités de construire et d'interpréter un modèle QSAR, de connaître les modalités d'identification correcte des interactions physiques favorables et défavorables entre le médicament et le récepteur.

8. Contenu

8.1 Cours	Méthodes d'enseignement	Nombre d'heures	Observations
1. LE PARADIGME CENTRAL DU QSAR (I) : La définition, la signification et l'importance du concept QSAR ; La notion d'activité biologique à niveau moléculaire et thermodynamique; La possibilité de quantification numérique de l'activité biologique.	Présentation orale + multimédia	1 h	
2. LE PARADIGME CENTRAL DU QSAR (II) : Les étapes principales du processus d'introduction sur le marché d'une nouvelle substance active; Les coûts associés à l'introduction sur le marché d'une nouvelle substance active; La ration du projet du médicament par méthodes computerisées.		1 h	
3. LE PARADIGME CENTRAL DU QSAR (III) : Les stratégies appliquées dans le projet rationnel de nouveaux médicaments, dans les cas où la structure tridimensionnelle du récepteur cible est connue ou pas; Le paradigme fondamental du QSAR; La position de ce paradigme dans le projet rationnel du médicament.		1 h	
4. LA QUANTIFICATION NUMERIQUE DE L'ACTIVITE BIOLOGIQUE : La définition de la notion de série congénère; Les principales méthodes de mesurage numérique de l'activité biologique par méthodes biophysiques, respectivement biochimiques; Méthodes d'équilibre thermodynamique, respectivement cinétiques de mesurage numérique de l'activité biologique.		1 h	
5. LA QUANTIFICATION NUMERIQUE DE LA STRUCTURE MOLECULAIRE : Descripteurs moléculaires structuraux classiques et modernes utilisés dans la quantification numérique de l'activité biologique; Modalités de calcul des descripteurs moléculaires structuraux à l'aide de l'ordinateur; Possibilités de détermination des descripteurs moléculaires structuraux de la structure par mesurages directs physico-chimique, par mesurage d'équilibre thermodynamique, respectivement cinétique.		1 h	
6. LA QUANTIFICATION NUMERIQUE DE L'ACTIVITE BIOLOGIQUE ET DE LA STRUCTURE MOLECULAIRE-applications sur ordinateur ; Présentation et utilisation d'un logiciel de mécanique moléculaire et de mécanique quantique pour l'obtention de structures moléculaires tridimensionnelles réalistiques (application sur l'ordinateur pour quelques molécules de médicament); Présentation et utilisation d'un logiciel de calcul des descripteurs structuraux numériques d'une structure moléculaire tridimensionnelle quelconque (application sur l'ordinateur – le calcul de quelques descripteurs pour les molécules choisies).		1 h	
7. L'ETABLISSEMENT DU MODELE QSAR PAR ANALYSE REGRESSION LINEAIRE (I) : Notions sur le modelage QSAR par régression linéaire multiparamétrique; La régression linéaire		1 h	

<p>multiparamétrique; Modalités de calcul des coefficients régressionnels spécifiques.</p>			
<p>8. L'ETABLISSEMENT DU MODELE QSAR PAR ANALYSE REGRESSION LINEAIRE (II) : Règles de test de la qualité statistique du modèle QSAR; Règles d'interprétation du modèle QSAR; Principes de réalisation correcte de l'analyse statistique des modèles régressionnels; La prédictivité des modèles régressionnels.</p>		1 h	
<p>9. L'ETABLISSEMENT DU MODELE QSAR PAR ANALYSE REGRESSION LINEAIRE (III) – applications sur l'ordinateur : La présentation et les principes de calcul d'un logiciel d'analyse régressionnelle; L'analyse régressionnelle d'une série d'analgesiques analogues de la capsaïcine (applications sur l'ordinateur); L'interprétation correcte et la relevance du modèle QSAR obtenu.</p>		1 h	
<p>10. L'ETABLISSEMENT DU MODELE QSAR PAR ANALYSE REGRESSION LINEAIRE (IV) – applications sur l'ordinateur : L'analyse régressionnelle d'une série d'inhibiteurs de l'alcooldehydrogenase, dérivés pyrazoliques; L'interprétation correcte du modèle QSAR résulté; La relevance du modèle QSAR obtenu.</p>		1 h	
<p>11. STRUCTURE DES BIOMACROMOLECULES (I) : Notions sur la structure tridimensionnelle des protéines de relevance pour les modèles QSAR; La structure primaire, secondaire, tertiaire et quaternaire des protéines (amino acides, les 4 niveaux de structure, alpha - hélix, feuilles beta – pliées, situs de liaison ligand); La structure des bases azotées, des nucléosides, des nucléotides, de l'ADN et l'ARN (acides nucléiques : bases azotées, nucléosides, nucléotides, double – hélix ADN, structure de l'ARN).</p>		1 h	
<p>12. STRUCTURE DES BIOMACROMOLECULES (II) : Notions d'intérêt dans les modèles QSAR, concernant la structure tridimensionnelle des membranes biologiques, cibles thérapeutiques; La structure de la membrane, des molécules „briques”, la structure de la double couche, les protéines de la membrane; L'analyse 3D de la structure des protéines; L'utilisation correcte d'un logiciel pour la visualisation de la structure des protéines (applications sur l'ordinateur).</p>		1 h	
<p>13. STRUCTURE DES BIOMACROMOLECULES (III) : La présentation d'un logiciel de graphique moléculaire, pour la réalisation de l'analyse 3D de la structure de quelques protéines et de leur interaction avec un ligand; La réalisation correcte d'une application sur l'ordinateur, sur une protéine de la base de données Brookhaven Protein Data Bank cocrystallisée avec un ligand; Modalités d'identification des interactions physiques favorables et défavorables entre un médicament et un récepteur; L'identification correcte des types principaux d'interactions ligand - récepteur du modèle étudié.</p>		1 h	
<p>14. EVALUATION</p>		1 h	
<p>Bibliographie obligatoire :</p> <p>1. Cours de Projet du Médicament – support en format électronique disponible sur https://moodle.umft.ro/ 2. Kurunczi L., „Proiectarea medicamentelor asistată de computer. QSAR. Relații cantitative structură – activitate.” Ed. Eurobit, Timișoara, 1998</p> <p>Bibliographie facultative :</p> <p>1. Hansch C., Leo A., „Exploring QSAR. Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology.” ACS Professional Reference Book, ACS, Washington, 1995 2. Leach A. R., Gillet V. J., „An Introduction to Chemoinformatics”, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003 3. Chiriac A., Ciubotariu D., Simon Z., Editori, „Relații cantitative structură chimică – activitate biologică (QSAR). Metoda</p>			

MTD.”, Editura Mirton, Timișoara, 1996			
8.2 Travaux dirigés / Laboratoire/Travaux pratiques/Stages	Méthodes d’enseignement - d’apprentissage	Nombre d’heures	Observations
-			
Bibliographie obligatoire:			
-			

9. Corroboracion des contenus de la matière avec les attentes des représentants des communautés épistémiques, des associations professionnelles et des employeurs représentatifs du domaine afférent au programme

Le cours de Projet du Médicament va assurer aux étudiants en Pharmacie la compréhension et l’acquisition de notions concernant les stratégies appliquées dans la découverte rationnelle de nouveaux médicaments. Ces notions vont offrir aux étudiants la possibilité d’évoluer en équipes pluridisciplinaires et de devenir conscients du fait que la recherche signifie l’application correcte et créatrice des connaissances accumulées.

10. Evaluation

Type d’activité	10.1 Critères d’évaluation	10.2 Méthodes d’évaluation	10.3 Pourcentage dans la note finale
10.4 Cours	<p><i>Connaissances nécessaires pour obtenir la note 5:</i> Il résulte de l’application du barème de correction : -Comprendre et apprendre les notions de base avec lesquelles fonctionne le projet du médicament</p> <p><i>Connaissances nécessaires pour obtenir la note 10:</i> Il résulte de l’application du barème de correction : -Application des connaissances acquises pour comprendre et expliquer les processus et phénomènes pertinents dans le domaine pharmaceutique. -Capacité à proposer un fil conducteur dans l’obtention d’un modèle QSAR adéquat</p>	<p><i>Evaluation finale:</i> Test de type questionnaire, avec 50 questions à choix multiple (dont maximum 35% avec une seule réponse).</p>	100 %
10.5 Travaux pratiques / Stages	-		
10.6 Standard minimum de performance			
- réussir l’examen théorique de la fin du semestre (note 5). - le respect de toutes les obligations contractuelles, selon le contrat d’étude			

Date du remplissage	Signature du titulaire du cours Prof.univ.dr. Ionuț-Valentin Ledeți	Signature du titulaire des travaux pratiques/ stages
Signature du chef de matière Prof.univ.dr. Ionuț-Valentin Ledeți		
Date de l’avis dans le département	Signature du directeur du département Prof.univ.dr. Laura Sbârcea	