

FIȘA DISCIPLINEI

DENUMIREA DISCIPLINEI	Tehnici de proiectare a medicamentelor in silico	cod: MBBM 10
-----------------------	---	--------------

ANUL DE STUDIU	MASTER	SEMESTRUL	I	STATUTUL DISCIPLINEI (AP-aprofundare/CC-obținere competente/F-facultativă)	AP
----------------	---------------	-----------	---	--	----

NUMĂRUL ORELOR PE SAPTĂMÂNĂ				TOTAL ORE SEMESTRU	TOTAL ORE ACTIVITATE INDIVIDUALĂ*	NUMĂR DE CREDITE	TIPUL DE EVALUARE (P-pe parcurs, C-coloquiu, E-examen, M-mixt)	LIMBA DE PREDARE
C	S	L	Pr.					
2	2	-	-	56	28		E	Română

TITULARUL DISCIPLINEI	GRADUL DIDACTIC ȘI ȘTIINȚIFIC, PRENUMELE, NUMELE	DEPARTAMENTUL
	LECTOR DR. Speranta Avram	Fiziologie Animala si Biofizica

DISCIPLINE ANTERIOR ABSOLVITE	Fiziologie Animala, Psihofarmacologie si Neurochimie, Fiziopatologie
-------------------------------	--

OBIECTIVE	<p>Disciplina de cunoastere avansata ce permite aprofundarea cunoasterii structurii medicamentelor si a functiei terapeutice a acestora.</p> <p>Implicarea, alaturi de alte discipline, la formarea unei viziuni integraliste asupra agentilor farmacologici</p> <p>Stimularea cercetarii intr-un domeniu de varf al farmacologiei actuale.</p>
TEMATICĂ GENERALĂ	<p>I. Notiuni introductive de farmacocinetica si farmacodinamie</p> <ul style="list-style-type: none"> -definitia farmacocineticii -definitia farmacodinamiei -etapele validarii unui medicament <p>II. Farmacologia agentilor antivirali (HIV1, SARS, HBV)</p> <ul style="list-style-type: none"> -biologia agentilor virali -biochimia agentilor virali -factori de risc infectios -asemanari si deosebiri ale procesului infectios viral <p>III Proiectia agentilor antivirali in silico-studii de modelare, QSAR, docare energetica</p> <ul style="list-style-type: none"> -selectarea ezimelor virale importante pentru procesul infectios -identificarea inhibitorilor -identificarea structurilor tridimensionale ale enzimelor virale -selectarea si discutarea studiilor de specialitate (modelare moleculara) <p>IV Farmacologia agentilor antimicrobieni – peptide antimicrobiene</p> <ul style="list-style-type: none"> - clase de agenti peptidici antimicrobieni -identificarea parametrilor farmacologici - selectarea si discutarea studiilor de specialitate (modelare moleculara) -obtinerea altor descriptori importanti pentru studiul prin simulare moleculara a agentilor peptidici <p>V Proiectia agentilor antimicrobieni in silico-studii de modelare, QSAR, docare energetica</p> <ul style="list-style-type: none"> -modelarea structurilor peptidice -minimizarea energetica a acestora -calculul de descriptori -reguli de selectie a acestor descriptori -calculul de activitati biologice prezise <p>VI Mecanismul de actiune a antibioticelor din clasa cefalosporinelor</p> <ul style="list-style-type: none"> - clasificarea antibioticelor -studiul legarii de proteinele plasmatic -structurile chimice si corelatia cu activitatea farmacologica -biorezistenta -criterii de selectie a antibioticelor <p>VII Abordari in silico a mecanismelor de actiune a antibioticelor</p> <ul style="list-style-type: none"> - selectarea si discutarea studiilor de specialitate (modelare moleculara) -modelarea structurilor antibiotice -minimizarea energetica a acestora -calculul de descriptori

	<p>-reguli de selectie a acestor descriptori -calculul de activitati biologice prezise</p> <p>VIII Farmacocinetica agentilor medicamentosi antiinflamatorii nesteroidieni si steroidieni</p> <p>- clasificarea agentilor antiinflamatorii -studiul mecanismelor de actiune a agentilor antiinflamatori in boli ale SNC -structurile chimice si corelatia cu activitatea farmacologica -biorezistenta -criterii de selectie a antiinflamatoriilor</p> <p>IX Studii in silico a agentilor antiinflamatori</p> <p>- selectarea si discutarea studiilor de specialitate (modelare moleculara) -modelarea structurilor antiinflamatorii -minimizarea energetica a acestora -calculul de descriptori -reguli de selectie a acestor descriptori -calculul de activitati biologice prezise</p> <p>X Farmacocinetica structurilor antipsihotice in interactie cu receptorii membranari</p> <p>-definirea psihozelor -factori de risc -tratament medicamentos -clasificarea si mecanismul de actiune a antipsihoticelor</p> <p>XI Proiectarea agentilor antipsihotici in silico-studii in silico</p> <p>- selectarea si discutarea studiilor de specialitate (modelare moleculara) -modelarea structurilor antipsihotice -minimizarea energetica a acestora -calculul de descriptori -reguli de selectie a acestor descriptori -calculul de activitati biologice prezise</p> <p>XII Farmacocinetica structurilor antidepresive si anxiolitice in interactie cu receptorii membranari</p> <p>-definirea depresiei si anxietatii -factori de risc -tratament medicamentos -clasificarea si mecanismul de actiune a antidepresivelor si anxioliticelor</p> <p>XIII Proiectarea agentilor antidepresivi si anxiolitice -studii in silico</p> <p>- selectarea si discutarea studiilor de specialitate (modelare moleculara) -modelarea structurilor antidepresivelor -minimizarea energetica a acestora -calculul de descriptori -reguli de selectie a acestor descriptori -calculul de activitati biologice prezise</p>
TEMATICA LUCRARILOR PRACTICE SI SEMINARIILOR	<p>I,II Notiuni introductive de modelare moleculara a structurilor chimice, evaluarea descriptorilor farmacologici in silico II-IV Proiectarea in silico a agentilor antivirali (HIV1, SARS, HBV), Proiectarea in silico a agentilor antimicrobieni V- VII, Proiectarea antibioticelor din clasa cefalosporinelor VIII-IX Proiectarea in silico a agentilor antiinflamatori X-XIII Proiectarea agentilor antipsihotici Proiectarea agentilor antidepresivi, Proiectarea agentilor anxiolitici</p>
METODE DE PREDARE	<p>La curs: prelegere, conversatie, problematizare La seminar: referate cu prezentarea metodelor in silico ce vor fi utilizate, lucrul direct cu literatura de specialitate,</p>

BIBLIOGRAFIE OBLIGATORIE (SELECTIV)	<ol style="list-style-type: none"> 1.Waller, C. L.; Oprea, T. I.; Giolitti, A.; Marshall, G. R. Three-dimensional QSAR of human immunodeficiency virus (I) protease inhibitors. 1. A CoMFA study employing experimentally-determined alignment rules. <i>J. Med. Chem.</i> 1993, <i>36</i>, 4152-4160. 2.Carosati, E.; Lemoine, H.; Spogli, R.; Grittner, D.; Mannhold, R.; Tabarrini, O.; Sabatini, S.; Cecchetti, V. Binding studies and GRIND/ALMOND-based 3D QSAR analysis of benzothiazine type K(ATP)-channel openers. <i>Bioorg. Med. Chem.</i> 2005, <i>13</i>, 5581-5591. 3.Sybyl Theory Manual (1988) Tripos Associates Inc., 1699 South Hanley Road, St. Louis, MO 63144. 4.Pastor, M.; Cruciani, G.; McLay, I.; Pickett, S.; Clementi, S. GRIND-Independent descriptors (GRIND): a novel class of alignment-independent three-dimensional molecular descriptors. <i>J. Med. Chem.</i> 2000, <i>43</i>, 3233-3243. 5.Hardman, J. G.; Limbird, L. E. <i>Goodman & Gillman's The Pharmacological Basis of Therapeutics</i>, 9th Ed; McGraw-Hill publisher, New York, SUA, 1996. 6. Homer, R. W.; Swanson, J.; Jilek, R. J.; Hurst, T.; Clark, R. D. SYBYL Line Notation (SLN): A Single Notation To
--	--

	Represent Chemical Structures, Queries, Reactions, and Virtual Libraries. <i>J. Chem. Inf. Model.</i> 2008 , <i>48</i> , 2294-2307
--	---

EVALUARE	condiții	Prezența la curs (minim 60%) și laborator (86%)
	criterii	<ol style="list-style-type: none"> 1. capacitatea de a lucra cu acuratețe și a obține rezultate reproductibile 2. capacitatea de a interpreta corect rezultatele obținute 3. capacitatea de a interpreta un articol de specialitate în domeniu, integrarea în literatura de specialitate, logica experimentală, concluziile studiului și de a prefigura tipul de investigații care se impun în viitor
	forme	Evaluare orală și scrisă
	formula notei finale	Evaluarea participării la activitățile de laborator 30% Răspunsurile la examinarea finală 40% Analiza de articole 15 % Redactarea raportului de laborator 15 %