

## FIȘA DISCIPLINEI

### 1. Date despre program

1.1 Instituția de învățământ superior	Univeristatea Babeș-Bolyai, Cluj-Napoca
1.2 Facultatea	Chimie și Inginerie Chimică
1.3 Departamentul	Chimie
1.4 Domeniul de studii	Chimie
1.5 Ciclul de studii	Masterat
1.6 Programul de studiu / Calificarea	Chimie Avansată / Chimist

### 2. Date despre disciplină

2.1 Denumirea disciplinei	Relația structură activitate biologică: CMR7222				
2.2 Titularul activităților de curs	Conf. Dr. Niculina Hădade				
2.3 Titularul activităților de seminar	Conf. Dr. Niculina Hădade				
2.4 Anul de studiu	I	2.5 Semestrul	2	2.6. Tipul de evaluare	E
					2.7 Regimul disciplinei
					Op.

### 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					33
Documentare suplimentară în bibliotecă, pe platformele electronice de specialitate și pe teren					14
Pregătire seminarii/laboratoare, teme, referate, portofolii și eseuri					14
Tutoriat					4
Examinări					4
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	• Studenții vor consulta suportul de curs pus la dispoziția lor înaintea fiecărui curs
5.2 De desfășurare a seminarului/laboratorului	• Nu este cazul

## 6. Competențele specifice acumulate

Competențe profesionale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Definirea notiunilor, conceptelor si teoriilor avansate si utilizarea limbajului specific in dezvoltarea de noi medicamente prin design rațional</li> <li>Explicarea si interpretarea unor proprietati, concepte si abordari ale compusilor biologic activi si relației structură activitate biologică. Stabilirea modalitatilor teoretice si experimentale de corelare structura-activitate biologică</li> <li>Utilizarea integrata a conceptelor si teoriilor avansate pentru rezolvarea de probleme noi privind designul și sinteza de substanțe cu acțiune terapeutică</li> <li>Utilizarea relației structură – activitate în vederea evaluării potențialului aplicativ a unor compusi bioactivi.</li> <li>Analiza critica a diverselor abordari teoretice si experimentale in determinarea proprietatilor care recomanda un compus/o clasa de compusi pentru utilizarea ca material</li> <li>Aplicarea teoriilor si conceptelor însușite pentru elaborarea unui proiect bazat pe date de literatura pentru identificarea relatiei dintre structura si proprietati si caracterizarea unui reprezentant cu potential aplicativ din clasele de compusi studiate.</li> </ul>
Competențe transversale	<ul style="list-style-type: none"> <li>Analiza, sinteza si comunicarea informatiilor cu caracter stiintific, cu respectarea normelor de etica profesională si de conduita morala.</li> <li>Utilizarea calculatorului: Office; xls</li> <li>Autoevaluarea si identificarea cunostintelor si abilitatilor necesare ocuparii unor pozitii profesionale, formarii continue si dezvoltarii profesionale in corelatie cu piata muncii</li> </ul>

## 7. Obiectivele disciplinei (reieșind din grila competențelor acumulate)

7.1 Obiectivul general al disciplinei	<ul style="list-style-type: none"> <li>Familiarizarea studenților cu noțiunile de bază și conceptele legate de structura, activitatea și proprietățile compușilor biologic activi utilizați în terapeutică. Corelarea structurii cu activitatea biologică</li> </ul>
7.2 Obiectivele specifice	<ul style="list-style-type: none"> <li>Dezvoltarea capacitatii de analiza a structurii compușilor biologic activi înțelegerea interacțiunilor acestora cu țintele lor biologice .</li> <li>Corelarea și utilizarea de cunoștințe de chimie organică, analiză structurală, biochimie, biologie moleculară și chimie teoretică</li> <li>Cunoștințe de bază privind structura, proprietățile, activitatea și toxicitatea compușilor biologic activi studiați precum și a mecanismelor de interacțiune medicament - țintă biologică.</li> <li>Dobândirea cunoștințelor necesare pentru aplicarea notiunilor fundamentale in scopul determinării relatiei structura-activitate biologica a compusilor organici și în designul rațional al medicamentelor.</li> <li>Dobândirea cunoștințelor referitoare la accesarea si utilizarea datelor cuprinse intr-o baza de date pentru calculul QSAR/QSPR.</li> <li>Cunoașterea și utilizarea adecvată a noțiunilor mentionate mai sus; explicarea, rezolvarea de probleme prin capacitatea de analiză și sinteză a conceptelor teoretice.</li> </ul>

## 8. Conținuturi

8.1. Curs	Metode de predare	Observații
8.1.1. Relația structură – activitate biologică: scop și definiții. Prezentare generală a metodelor de identificare de noi medicamente. Designul rațional al Medicamentelor.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.2. Identificarea compusului biologic activ de bază ( <i>lead compound</i> ). Surse de compuși biologic activi.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.3 Identificarea compusului biologic activ de bază ( <i>lead compound</i> ). Tehnici de <i>screening</i> .	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.4. Modificarea compusului biologic activ de bază în vederea îmbunătățirii proprietăților (activitate, toxicitate, absorbție, metabolizare, eliminare). Serii omoloage, Ramificarea, Bioizosteri.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.5. Modificarea compusului biologic activ de bază în vederea îmbunătățirii proprietăților (activitate, toxicitate, absorbție, metabolizare, eliminare). Transformarea ciclu-catenă. Conformația biologic activă	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.6. Modificarea compusului biologic activ de bază în vederea îmbunătățirii proprietăților. Peptidomimetici	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.7. Interacțiunea medicament țintă biologică. Tipuri de interacțiuni implicate în compecșii medicament-țintă biologică. Recunoasterea moleculară	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.8. Interacțiunea medicament țintă biologică. Determinarea interacțiunilor medicament – receptor. Agoniști și antagoniști ai receptorilor.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.9. Interacțiunea medicament țintă biologică. Mecanisme. Considerații stereochemice	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.10. Inhibitori ireversibili ai enzimelor	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.11. Inhibitori reversibili ai enzimelor	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.12. Medicamente care interacționează cu acizii nucleici.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.13. Promedicamente de tip medicament-transporter.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	
8.1.14. Sisteme macromoleculare de transport a medicamentelor.	Prelegerea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	

### Bibliografie

1. Suport de curs în format pdf pus la dispoziție de către titularul de disciplină.
2. Richard B. Silverman, Mark W. Holladay *The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action* Ediția a-3-a San Diego, CA: Academic Press, **2014**.

3. D Livingstone; Andrew M Davis <i>Drug design strategies: quantitative approaches</i> , Royal Society of Chemistry (Great Britain), Cambridge : RSC Pub., <b>2012</b> . 4. M. V. Diudea, M. S. Florescu, and P. V. Khadikar, <i>Molecular Topology and Its Applications</i> , EFICON, București, <b>2006</b> . 5. Review-uri și articole din literatura științifică recentă (Wiley, ACS, RCS, Elsevier)		
8.2 Seminar / laborator	Metode de predare	Observații
8.2.1. Protecția muncii. Prezentarea tematicii lucrărilor de laborator.	Conversația, învățarea prin descoperire,	2 ore
8.2.2. Sinteza benzocainei în 4 etape plecând de la p-toluidină: Prepararea N-acetil p-toluidinei	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	4 ore
8.2.3. Sinteza benzocainei în 4 etape plecând de la p-toluidină: Prepararea acidului N-acetil p-aminobenzoic	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	4 ore
8.2.4. Sinteza benzocainei în 4 etape plecând de la p-toluidină: 3) Prepararea acidului p-aminobenzoic	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	4 ore
8.2.5. Sinteza benzocainei în 4 etape plecând de la p-toluidină: Prepararea și purificarea benzocainei	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	4 ore
8.2.6. Surse de compuși prototip. Metode și tehnici de screening. Aspirina, Peniciline	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme.	2 ore
8.2.7. Identificarea de compuși prototip pe bază de fragmente. Studiul complexilor prin spectrometrie de masă	Experimentarea, conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.2.8. Efectul modificărilor structurale asupra eficienței și proprietăților farmacocinetice. Taxolul	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.2.9. Optimizarea eficienței, selectivității, lipofilicității, toxicității. Calculul log P.	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
8.2.10. Metode computaționale în modificarea compusului prototip.	Conversația, învățarea prin descoperire, rezolvare de probleme	2 ore
1. Richard B. Silverman, Mark W. Holladay <i>The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action</i> Ediția a-3-a San Diego, CA: Academic Press, <b>2014</b> . 2. K.C. Nicolaou and. T. Montagnon - <i>Molecules That Changed The World</i> , Wiley-VCH, 2008. 3. Articole științifice în acord cu tematica cursului și a lucrărilor de laborator (colecția Wiley, ACS, Elsevier, RSC) 4. Referate de laborator puse la dispoziția studenților de către titularul de disciplină; 5. Cercasov, F. Dumitrașcu, C-V Popa, C. Drăchici, Compuși cu acțiune terapeutică naturali și de sinteză, Ed. Universității din București, 2004		

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

- Prin însușirea conceptelor tematico-metodologice și abordarea aspectelor practice incluse în disciplina relația structură activitate biologică, studenții primesc un bagaj de cunoștințe care e în concordanță cu competențele parțiale cerute pentru ocupațiile posibile prevăzute în Grila 2M - RNCIS

## 10. Evaluare

Tip activitate	10.1 Criterii de evaluare	10.2 metode de evaluare	10.3 Pondere din nota finală
10.4 Curs	Gradul de însușire a tematicii tratate la curs și înțelegerea noțiunilor ilustrate prin răspunsuri corecte	Examen oral Frauda la examen se pedepsește prin exmatriculare conform regulamentului ECTS al UBB	60%
	Modul de gândire, corectitudinea și argumentarea soluțiilor problemelor și exercițiilor		
10.5 Seminar/laborator	Corectitudinea răspunsurilor la exerciții și probleme, dovedind înțelegerea și însușirea tematicii	Verificare pe parcurs	40%
	Prezentarea unui medicament comercial, identificare de prototip, modificari structurale, faze de testare.	Verificarea pe parcurs	
10.6 Standard minim de performanță			
<ul style="list-style-type: none"><li>Obținerea notei 5 (cinci) la examen conform baremului, condiționarea intrării în examen de susținerea verificării de la seminar (cu minim 5(cinci))</li><li>Surse de compuși biologic activi, metode de screening, metode de validare a structurii, determinarea eficienței ligandului și a indicelui terapeutic</li><li>Identificarea farmacoforului, grupărilor auxofore, a interacțiunilor medicament-țintă biologică.</li><li>Minim nota 5 pentru fiecare laborator</li><li>Minim nota 5 pentru fiecare referat.</li></ul>			

Data completării

15.04.2022

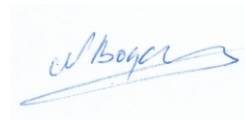
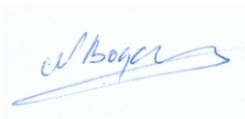
Semnătura titularului de curs

Conf. Dr. Niculina D. Hădade

Semnătura titularului de seminar

Conf. Dr. Niculina D. Hădade

.....



Data avizării în departament

15 aprilie 2022

Semnătura directorului de departament

Acad. Prof. Dr. Cristian Silvestru

