



Projektowanie leków

Fakultatywny blok programowy- Fakultet 2a

1. METRYCZKA	
Rok akademicki	2023/2024
Wydział	Wydział Farmaceutyczny
Kierunek studiów	Farmacja
Dyscyplina wiodąca	Nauki Farmaceutyczne
Profil studiów	<i>praktyczny</i>
Poziom kształcenia	<i>jednolite magisterskie</i>
Forma studiów	<i>stacjonarne</i>
Typ modułu/przedmiotu	<i>fakultatywny</i>
Forma weryfikacji efektów uczenia się	<i>zaliczenie</i>
Jednostka prowadząca /jednostki prowadzące	1. Zakład Chemii Organicznej i Fizycznej 2. Zakład Chemii Farmaceutycznej i Biomateriałów
Kierownik jednostki/kierownicy jednostek	1. dr hab. Piotr Luliński 2. dr hab. Edyta Pindelska
Koordinator przedmiotu	<i>dr hab. Dariusz Maciej Pisklak</i>
Osoba odpowiedzialna za sylabus)	<i>dr hab. Dariusz Maciej Pisklak dariuszpisklak@wum.edu.pl</i>
Prowadzący zajęcia	Zakład Chemii Organicznej i Fizycznej - dr J. Kurkowiak - dr hab. Ł. Szeleszczuk - dr hab. D. Pisklak - dr M. Sobiech - dr T. Żótek - dr P. Kazimierczak - dr hab. W. Ozimiński Katedra Chemii Analitycznej i Biomateriałów - prof. dr hab. Marcin Sobczak - dr hab. Edyta Pindelska

--	--

2. INFORMACJE PODSTAWOWE

Rok i semestr studiów	V rok , semestr IX	Liczba punktów ECTS	12.00
FORMA PROWADZENIA ZAJĘĆ		Liczba godzin	Kalkulacja punktów ECTS
Godziny kontaktowe z nauczycielem akademickim			
wykład (W)	50	1,75	
seminarium (S)	50	1,75	
ćwiczenia (C)	70	2,5	
e-learning (e-L)			
zajęcia praktyczne (ZP)			
praktyka zawodowa (PZ)			
Samodzielna praca studenta			
Przygotowanie do zajęć i zaliczeń	170		

3. CELE KSZTAŁCENIA

C1	Poszerzenie wiedzy dotyczącej mechanizmów fizyko-chemicznych odpowiedzialnych za oddziaływanie leku z receptorem
C2	Poszerzenie wiedzy dotyczącej molekularnych podstaw działania leków ze szczególnym uwzględnieniem aktywności receptorowej i procesu przekazywania sygnału w obrębie komórki.
C3	Poszerzenie wiedzy dotyczące struktury receptorów oraz mechanizmów ich aktywacji
C4	Rozszerzenie wiedzy w zakresie oddziaływań międzycząsteczkowych, w tym w układach
C5	Zdobycie wiedzy dotyczącej struktur supramolekularnych
C6	Opanowanie metod bioinformatyki i analizy danych.
C7	Przygotowanie studentów do wykorzystania metod bioinformatycznych oraz analizy danych do opracowania i interpretacji obserwacji i pomiarów w praktyce laboratoryjnej.
C8	Przedstawienie podstawowych pojęć chemii teoretycznej i kwantowej
C9	Poznanie podstaw teoretycznych metod wykorzystywanych w modelowaniu molekularnym
C10	Poznanie metod stosowanych w komputerowo wspomaganym projektowaniu leków
C11	Zdobycie umiejętności doboru odpowiedniej metodyki oraz wykorzystania metod modelowania molekularnego w analizie danych eksperymentalnych.
C12	Zaznajomienie studentów z metodami chemii obliczeniowej do przewidywania struktury, właściwości fizykochemicznych i reaktywności związków chemicznych i układów biochemicznych

C13	Zdobycie umiejętności doboru odpowiedniej metodyki oraz wykorzystania metod modelowania molekularnego w analizie danych eksperymentalnych.
C14	Zdobycie umiejętności wykorzystania metod wspomaganych komputerowo w projektowaniu leków (CADD)
C15	Zdobycie wiedzy na temat możliwości wykorzystania analizy bioinformatycznej oraz baz bioinformatycznych w projektowaniu leków
C16	Umiejętność analizowania materiału literaturowego w procesie projektowania substancji o zaplanowanych właściwościach (wybór struktur wiodących, wybór metod syntezy nowych substancji i materiałów, krytyczna ocena otrzymanych rezultatów).
C17	Poszerzenie wiedzy dotyczącej podstawowych metod wnioskowania statystycznego.
C18	Opanowanie metod analizy zależności zmiennych.
C19	Zdobycie rozszerzonej wiedzy w zakresie stereochemii związków o aktywności biologicznej i zależnościami pomiędzy budową a aktywnością biologiczną biomolekuł
C20	Zdobycie rozszerzonej wiedzy w zakresie przewidywania właściwości związków organicznych na podstawie ich struktury.
C21	Zdobycie rozszerzonej wiedzy i zrozumienie roli nowoczesnej syntezy organicznej w projektowaniu substancji.
C22	Zaznajomienie z wiadomościami z zakresu projektowania i technologii nowoczesnych postaci leków.
C23	Zdobycie wiedzy na temat aktualnych trendów rozwoju nanofarmacji
C24	Poznanie podstawowych praw i pojęć krystalograficznych oraz sposobu klasyfikacji ciał krystalicznych opartego na symetrii.
C25	Zaznajomienie się z technikami dyfrakcji i rozpraszania promieniowania rentgenowskiego, elektronowego i neutronów na monokryształach jak i na próbkach polikrystalicznych oraz ich zastosowanie w analizie strukturalnej
C26	Poznanie parametrów geometrycznych opisujących strukturę cząsteczki i powiązania struktury cząsteczki z aktywnością biologiczną związku
C27	Poznanie sposobów modyfikacji struktury substancji krystalicznych farmakologicznie aktywnych. Wpływ tych modyfikacji na zmianę właściwości fizykochemicznych.
C28	Nabywanie umiejętności korzystania z różnych form prezentacji wyników badań rentgenograficznych, jak i z różnych źródeł informacji krystalograficznej: czasopisma naukowe, krystalograficzne bazy danych.

4. STANDARD KSZTAŁCENIA – SZCZEGÓŁOWE EFEKTY UCZENIA SIĘ

Symbol i numer efektu uczenia się zgodnie ze standardami uczenia się	Efekty w zakresie (zgodnie z załącznikiem do Rozporządzenia Ministra NiSW z 26 lipca 2019)
--	--

Wiedzy – Absolwent* zna i rozumie:

B.W6.	mechanizmy tworzenia i rodzaje wiązań chemicznych oraz mechanizmy oddziaływań międzycząsteczkowych;
B.W22.	budowę, właściwości i sposoby otrzymywania polimerów stosowanych w technologii farmaceutycznej;
B.W27.	metody teoretyczne stosowane w farmacji oraz podstawy bioinformatyki i modelowania cząsteczkowego w zakresie projektowania leków.
C.W3.	zależności pomiędzy strukturą chemiczną, właściwościami fizykochemicznymi i mechanizmami działania substancji leczniczych;

C.W13.	metody poszukiwania nowych substancji leczniczych
C.W40.	możliwości zastosowania nanotechnologii w farmacji
C.W47.	polimery biomedyczne oraz wielkocząsteczkowe koniugaty substancji leczniczych i ich zastosowanie w medycynie i farmacji.
D.W12.	punkty uchwytu i mechanizmy działania leków oraz osiągnięcia biologii strukturalnej w tym zakresie

Umiejętności – Absolwent* potrafi:

B.U9.	.analizować właściwości i procesy fizykochemiczne stanowiące podstawę działania biologicznego leków i farmakokinetyki
B.U12.	stosować narzędzia informatyczne do opracowywania i przedstawiania danych oraz twórczego rozwiązywania problemów
C.U3.	oceniać, na podstawie budowy chemicznej, właściwości substancji do użytku farmaceutycznego;

*W załącznikach do Rozporządzenia Ministra NiSW z 26 lipca 2019 wspomina się o „absolwencie”, a nie studencie

5. POZOSTAŁE EFEKTY UCZENIA SIĘ

Numer efektu uczenia się	<i>(pole nieobowiązkowe)</i> Efekty w zakresie
---------------------------------	--

Wiedzy – Absolwent zna i rozumie:

FBP_W26	Posiada poszerzoną wiedzę na temat nanomateriałów oraz układów polimerowych wykorzystywanych w farmacji
FBP_W27	Posiada wiedzę z zakresu chemii teoretycznej oraz metod modelowania molekularnego
FBP_W28	Posiada poszerzoną wiedzę w zakresie bioinformatyki oraz analizy genomowej metodami bioinformatycznymi
FBP_W29	Posiada wiedzę z zakresu krystalografii oraz chemii strukturalnej
FBP_W30	Posiada poszerzoną wiedzę z zakresu metod wykorzystywanych w projektowaniu leków
FBP_W31	Posiada rozszerzoną wiedzę w zakresie analizy statystycznej i analizy chemometrycznej oraz możliwości jej wykorzystania w analizie farmaceutycznej
FBP_W33	Posiada poszerzoną wiedzę w zakresie nowoczesnej syntezy organicznej

Umiejętności – Absolwent potrafi:

FBP_U19	Posiada poszerzone umiejętności w zakresie wykorzystania metod modelowania molekularnego do opisu zjawisk chemicznych oraz w analizie i interpretacji danych eksperymentalnych
FBP_U20	Potrafi wykorzystać metody modelowania molekularnego oraz metody bioinformatyczne w projektowaniu leków
FBP_U21	Potrafi wykorzystać metody analizy statystycznej i analizy chemometrycznej w analizie farmaceutycznej oraz projektowaniu leków

FBP_U22	Potrafi korzystać z informacyjnych baz danych oraz analizować zdeponowane tam dane
FBP_U23	Posiada umiejętności posługiwania się metodami matematycznymi wykorzystywanymi w bioinformatyce, modelowaniu molekularnym oraz analizie chemometrycznej

Kompetencji społecznych – Absolwent jest gotów do:

K7	korzystania z obiektywnych źródeł informacji
K8	formułowania wniosków z własnych pomiarów lub obserwacji

6. ZAJĘCIA		
Forma zajęć	Treści programowe	Efekty uczenia się
W1	<p>Stereochemia biomolekuł 10h</p> <ul style="list-style-type: none"> -Stereochemia – podstawowe i rozszerzone pojęcia, chiralność, achiralność molekuł -Operacje chemiczne na centrach stereogenicznych, syntezy enancjoselektywne (wybrane przykłady) -Chemia biomakromolekuł. Podstawy chemicznej syntezy polipeptydów. Struktura przestrzenna oraz funkcje biologiczne polipeptydów -Właściwości fizykochemiczne oraz funkcje biologiczne białek -Wpływ modyfikacji struktury na aktywność biologiczną polipeptydów i białek -Wykorzystanie metod modelowania w projektowaniu układów stereogenicznych 	B.W27. C.W3. C.W13. C.W47. FBP_W26 FBP_W30 FBP_W33
W2	<p>Chemia supramolekularna-10h</p> <ul style="list-style-type: none"> -Chemia supramolekularna – definicja, przykłady, właściwości związków supramolekularnych - Kompleksy typu „gość-gospodarz”, przykłady, oddziaływania międzycząsteczkowe - Syntetyczne receptory jonowe i ich znaczenie - Syntetyczne receptory molekularne i ich rola w projektowaniu leków 	B.W6. C.W47. C.U3. FBP_W26 FBP_W30 FBP_W33
W3	<p>Nowoczesne postaci leków 10h</p> <ul style="list-style-type: none"> -Zasady projektowania innowacyjnych postaci leków. -Nano- i mikrocząsteczki substancji leczniczych. - Proleki wielkocząsteczkowe. - Dendrymery i dendrymery domino. - Hydrożelowe nośniki substancji leczniczych. 	B.W22. C.W40. C.W47. C.U3. FBP_W26
W4	<p>Wybrane zagadnienia chemii strukturalnej 20h</p> <ul style="list-style-type: none"> -Podstawy krystalografii geometrycznej. Układy krystalograficzne. Operacje i elementy symetrii grup punktowych (klasy symetrii). Symetria translacyjna sieci. Sieci Bravais'ego. Strukturalne elementy symetrii. Grupy przestrzenne. Interpretacja informacji zawartych w Międzynarodowych Tablicach Międzynarodowej Unii Krystalograficznej (IUCr). -Rentgenowska analiza strukturalna. Zjawisko dyfrakcji – dyfrakcja promieni rentgenowskich, dyfrakcja neutronów i elektronów. Źródła 	B.W6. FBP_W29

	<p>promieniowaniarentgenowskiego i jego oddziaływanie z materią. Warunki dyfrakcji na kryształach. Równania Lauego i Braggów. Sieć odwrotna, konstrukcja sfery Ewalda. -Wygaszenia refleksów i ich związek z grupami przestrzennymi. Związek intensywności refleksów z rozkładem gęstości elektronowej w kryształach. Transformacja fourierowska. Czynniki wpływające na intensywność wiązki ugiętej. Czynniki struktury - pomiar i zastosowanie. -Problem fazowy. Metody bezpośrednie. Mapy gęstości elektronowej. Udokładnienie struktury. Uogólnienie wyników z wykorzystaniem bazy danych krystalograficznych (CSD). - Badania materiałów polikrystalicznych. Teorie wzrostu kryształów i metody ich otrzymywania. Elementy krystalochemii ,klasyfikacje struktur; -Krystalochemia substancji farmakologicznie czynnych. Kokryształizacja, polimorfizm, chiralność i struktura absolutna.</p>	
S1	<p>Modelowanie molekularne i projektowanie leków 10h - Metody modelowania molekularnego - Metody mechaniki klasycznej, podstawy i zastosowanie - Metody dynamiki molekularnej, podstawy i zastosowanie - Metody mechaniki kwantowej -Wstęp do metod projektowania leków - Metody bazujące na znajomości struktury celu molekularnego (Structure based drug design) - Metody bazujące na znajomości struktur ligandów -QSAR, COMFA (Ligand based drug design)</p>	B.W6., B.W27. C.W3. C.W13. B.U9. FBP_W27, FBP_W28 FBP_W30
S2	<p>Biostatystyka 15h -Wnioskowanie statystyczne -Zależność i niezależność cech. Korelacja Pearsona i Spearmana -Regresja liniowa -Walidacja metod analitycznych - Testy nieparametryczne</p>	FBP_W31 FBP_U21 FBP_U23 K8
S3	<p>Chemia supramolekularna 5h -Występowanie w przyrodzie i zastosowanie związków heterocyklicznych</p>	B.U9. K7
S4	<p>Podstawy chemii kwantowej 15h -Niezbędne pojęcia matematyczne. - Postulaty mechaniki kwantowej - Jednowymiarowe modele kwantowe (cząstka w pudle, oscylator). - Wielowymiarowe modele kwantowe (rotator, atom wodoru, molekularny jon wodoru). - Funkcja falowa wieloelektrodowa - Metoda wariacyjna. Metoda Hartree-Focka. - Metoda funkcjonału gęstości.</p>	FBP_W27
S5	<p>Mechanizmy oddziaływania lek receptor 5h -Budowa i podział receptorów - Mechanizm oddziaływania ligand –receptor -Termodynamika oddziaływania ligand –receptor - Rola entropii i solwatacji</p>	B.W6. C.W3. D.W12. B.U9. K7
C1	<p>Modelowanie molekularne i projektowanie leków 45h - Podstawy obsługi pakietów obliczeniowych - Zastosowanie metod mechaniki molekularnej do opisu struktur układów molekularnych - Metody mechaniki kwantowej i ich zastosowanie w przewidywaniu struktury i właściwości układów molekularnych - Zastosowanie metod periodycznych mechaniki kwantowej do opisu struktury i właściwości układów krystalicznych</p>	C.W13. B.U12. FBP_W27, FBP_W28, FBP_W29 FBP_W30 FBP_U19 FBP_U20 FBP_U22 FBP_U23 K7 K8

	<ul style="list-style-type: none"> - Bazy struktura białkowych - Wykorzystanie metod dokowania w projektowaniu leków - Zastosowanie metody QSAR w optymalizacji struktury wiodącej - Zastosowanie metod symulacji molekularnych do opisu właściwości układów chemicznych 	
C2	<p>Chemia supramolekularna 10h</p> <ul style="list-style-type: none"> - Zastosowanie metod modelowania molekularnego w projektowaniu układów supramolekularnych 	B.U9. B.U12. FBP_U20 K7 K8
C3	<p>Nowoczesne postaci leków 5h</p> <p>Hydrożele i nanocząstki polimerowe w celowanej terapii nowotworów.</p>	B.U12. K7 K8
C4	<p>Wybrane zagadnienia chemii strukturalnej 10h</p> <ul style="list-style-type: none"> - Elementy symetrii makroskopowej. Kombinacje elementów symetrii i klasy symetrii. Wykreślanie projekcji elementów symetrii grup punktowych. - Strukturalne elementy symetrii. Zapoznanie się z działaniem osi śrubowych, płaszczyzn ślizgowych osiowych, diagonalnych i diamentowych. Wyznaczanie kierunków i punktów symetrycznie równoważnych. Wtórne elementy symetrii i grupy przestrzenne. Ćwiczenia z Międzynarodowymi Tablicami Krystalograficznymi. Najważniejsze zadania i problemy krystalograficzne – powtórka przed kolokwium. - Wyznaczenie struktury przestrzennej krystalicznej substancji farmakologicznie czynnej. - Wykorzystanie pakietu programów The Cambridge Structural Database (CSD) do rozwiązywania zagadnień z zakresu chemii medycznej i farmacji. - Przedstawienie 10 minutowej prezentacji na temat aktualnych doniesień literaturowych dotyczących wykorzystania krystalochemii w rozwiązywaniu zagadnień farmaceutycznych. 	FBP_W29 FBP_U22 K7 K8

7. LITERATURA

Obowiązkowa

1. Materiały oraz artykuły naukowe udostępnione przez prowadzących zajęcia
2. Zając M., Pawełczyk E., Jelińska A.; Chemia leków, AM Poznań 2006;
3. Patrick G.L.; Chemia medyczna; WNT 2003;
4. Rabek J. F.. Współczesna wiedza o polimerach. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2009.

Uzupełniająca

1. Leach A. : Molecular Modelling: Principles and Applications Pearson Educational Limited
2. Piela L. Idee chemii kwantowej PWN 2011

8. SPOSOBY WERYFIKACJI EFEKTÓW UCZENIA SIĘ

Symbol przedmiotowego efektu uczenia się	Sposoby weryfikacji efektu uczenia się	Kryterium zaliczenia
<p>B.W6., B.W22. B.W27., C.W3. C.W13., C.W40. C.W47., D.W12. B.U9., B.U12., C.U3.</p>	<p>Zaliczenie testowe z możliwością pytań otwartych. Obecność obowiązkowa na zajęciach.</p>	<p>Zaliczenie bloku wymaga zdobycia na teście co najmniej 51% możliwych punktów.</p>

FBP_W26, FBP_W27 FBP_W28, FBP_W29 FBP_W30, FBP_W31 FBP_W33 FBP_U19, FBP_U20 FBP_U21, FBP_U22 FBP_U23 K7, K8		

9. INFORMACJE DODATKOWE

Warunkiem dopuszczającym do zaliczenia jest obecność na wszystkich seminariach oraz realizacja programu ćwiczeń. W wyjątkowych przypadkach prowadzący zajęcia może dopuścić do zaliczenia na ustalonych przez prowadzącego zasadach.

Informacje dotyczące przedmiotów zamieszczone są w przewodniku dydaktycznym. Konsultacje z nauczycielami akademickimi udzielane są w godzinach pracy Zakładów.

Warunkiem przystąpienia do ćwiczeń jest posiadanie aktualnego ubezpieczenia.

Przedmioty realizowane w ramach bloku są zaliczane na ocenę w formie zaliczenia testowego z możliwością obecności pytań otwartych. Zaliczenie odbywa się pod koniec każdego semestru, w którym były prowadzone zajęcia z danego przedmiotu. Liczba uzyskanych punktów procentowych decyduje o ocenie.

ocena	kryteria
2,0 (ndst)	uzyskanie poniżej 51 % punktów
3,0 (dost)	51% < procentowy udział punktów ≤60%
3,5 (ddb)	61% < procentowy udział punktów ≤70%
4,0 (db)	71% < procentowy udział punktów ≤80%
4,5 (pdb)	81% < procentowy udział punktów ≤90%
5,0 (bdb)	91% < procentowy udział punktów ≤100%

Student posiada możliwość dwukrotnego podejścia do testu zaliczeniowego.

Ocena jest wpisywana do indeksu przez opiekuna bloku

Osoba odpowiedzialna za organizację dydaktyki: dr hab. Dariusz Pisklak Zakład Chemii Fizycznej email: dpisklak@wum.edu.pl

Miejsce wykładów i seminariów: sale wykładowe Wydziału Farmaceutycznego

Miejsce ćwiczeń: sale ćwiczeń Wydziału Farmaceutycznego

Prawa majątkowe, w tym autorskie, do sylabusu przysługują WUM. Sylabus może być wykorzystywany dla celów związanych z kształceniem na studiach odbywanych w WUM. Korzystanie z sylabusu w innych celach wymaga zgody WUM.

UWAGA

Końcowe 10 minut ostatnich zajęć w bloku/semestrze/roku należy przeznaczyć na wypełnienie przez studentów Ankiety Oceny Zajęć i Nauczycieli Akademickich