OFERTĂ CURSURI OPŢIONALE
AN UNIVERSITAR 2021 - 2022

Item-uri	*Cerinţe*
Titlul cursului	**Importanța modelării moleculare în dezvoltarea de noi medicamente**
Obiective	Dobândirea de noţiuni necesare înţelegerii tehnicilor moderne de prezicere a structurii moleculare, în vederea dezvoltării de noi medicamente.
Grup ţintă	Studenții Facultății de Farmacie, anul V
Participanţi	Număr minimum 30; maximum acceptat 70
Tematica propusă	• Cercetarea și dezvoltarea medicamentului: identificarea de noi potențiali agenți terapeutici, interacțiunea medicament-țintă biologică, optimizarea design-ului molecular; screening de înaltă performanță, teste preclinice și clinice; validarea agenților terapeutici. • Metode de modelare moleculară: grupări funcționale farmacofore, prodroguri. • Utilizarea tehnicilor computerizate în dezvoltarea de noi entități moleculare (CADD-Computer Assisted Drug Discovery): relații structură chimică – activitate (QSAR), programe de predicție/simulare a efectelor biologice (ADMET, MedChem Designer, docking - AUTODOCK). Aplicații ale tehnicilor moderne de predicție sau simulare în dezvoltarea de medicamente din clase terapeutice diferite (AINS, substanțe care acționează la nivelul sistemului nervos central și la nivel cardiovascular).
Bibliografia	1. Ekinci D. Medicinal chemistry and drug design. InTech, Rijeka, 2012. 2. Roy K. In Silico Drug Design. Repurposing Techniques and Methodologies. Academic Press, 2019. Merz KM, Ringe D, Reynolds CH. Drug design. Structure-

	and ligand-based approaches. Cambridge University Press, New York, 2010.
Competenţe profesionale și transversale	Înţelegerea principiilor de bază privind proiectarea medicamentului. Capacitatea de a putea utiliza modularea structurală în cercetarea farmaceutică și de a lucra cu tehnici de simulare sau predicție computerizată, în vederea obținerii de medicamente care să posede proprietăți farmacocinetice și farmacotoxicologice îmbunătățite.
Metode de predare şi materiale de curs	Prezentare interactivă PowerPoint, cu videoproiecție
Calendarul desfăşurării, orar, locaţia	Semestrul II, 1 ora curs/sapt, 14 săptămâni; orarul va fi stabilit în intervalul 7.30-19.30, locație: Facultatea de Farmacie
Responsabil curs	**Șef lucr. dr. Maria Apotrosoaei**
Lectori asociaţi	Sef. lucr. dr. Ioana Vasincu
Cuvinte cheie	Medicament, modelare moleculară, predicție/simulare computerizată