


**KAPITAŁ LUDZKI**  
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez  
 Unię Europejską w ramach  
 Europejskiego Funduszu  
 Społecznego

**UNIA EUROPEJSKA**  
 EUROPEJSKI  
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


|  |                 |   |   |
|--|-----------------|---|---|
| <b>Nazwa przedmiotu</b>  |                 | <b>Kod ECTS</b>   |   |
| Projektowanie nowych chemioterapeutyków  |                 | 13.3.0834   |   |
| <b>Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot</b>   |                 |   |   |
| Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska  |                 |   |   |
| <b>Studia</b>  |                 |   |   |
| <b>wydział</b>   | <b>kierunek</b> | <b>poziom</b>   | <b>drugiego stopnia</b>   |
| Wydział Chemii   | Chemia          | forma   | stacjonarne   |
|  |                 | moduł   | chemia biomedyczna, analityka i diagnostyka chemiczna, chemia i |
|  |                 | specjalnościowy   | technologia środowiska, chemia obliczeniowa                     |
|  |                 | specjalizacja   | wszystkie   |
| <b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>  |                 |   |   |
| dr inż. Karolina Jagiełło; Filip Stoliński; Sattibabu Merugu   |                 |   |   |
| <b>Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin</b>  |                 | <b>Liczba punktów ECTS</b>  |   |
| <b>Formy zajęć</b>   |                 | 3   |   |
| Wykład, Ćw. laboratoryjne  |                 | zajęcia - 45 godz.  |   |
| <b>Sposób realizacji zajęć</b>   |                 | konsultacje - 10 godz.  |   |
| zajęcia w sali dydaktycznej  |                 | praca własna studenta - 20 godz.  |   |
| <b>Liczba godzin</b>   |                 | RAZEM: 75 godz. - 3 ECTS  |   |
| Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 30 godz.  |                 |   |   |
| <b>Termin realizacji przedmiotu</b>  |                 |   |   |
| 2022/2023 letni  |                 |   |   |
| <b>Status przedmiotu</b>   |                 | <b>Język wykładowy</b>  |   |
| fakultatywny (do wyboru)   |                 | polski  |   |
| <b>Metody dydaktyczne</b>  |                 | <b>Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne</b>   |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>- Wykład z prezentacją multimedialną</li> <li>- wykonywanie zestawu ćwiczeń na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą i dyskusją uzyskanych wyników w formie pisemnego sprawozdania.</li> </ul> |                 | <b>Sposób zaliczenia</b>  |   |
|  |                 | Zaliczenie na ocenę   |   |
|  |                 | <b>Formy zaliczenia</b>   |   |
|  |                 | Wykład:<br>•zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi<br>Ćwiczenia laboratoryjne:<br>•wykonywanie zestawu ćwiczeń w sali komputerowej oraz pisemna prezentacja uzyskanych wyników po każdym ćwiczeniu (sprawozdania),<br>•ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych.   |   |
|  |                 | <b>Podstawowe kryteria oceny</b>  |   |
|  |                 | Wykład:<br>Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu i ćwiczeń laboratoryjnych. Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.<br>Ćwiczenia laboratoryjne:<br>Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń<br>Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.<br>Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią arytmetyczną ocen otrzymanych ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia. Niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia. |   |

**Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się**

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Student podczas zaliczenia pisemnego odpowiada na pytania dotyczące podstawowych mechanizmów działania chemioterapeutyków i wskazuje na czym polega projektowanie nowych leków (K\_W06, K\_W07); wskazuje zastosowania metod komputerowych w projektowaniu leków (K\_W08) oraz oprogramowania wykorzystywane w modelowaniu (Q)SAR (K\_W10).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Podczas prezentacji oceniane są umiejętności studenta w samodzielnym zbudowaniu prostego modelu QSAR (K\_U01), w krytycznej weryfikacji uzyskanych rezultatów modelowania, prowadzenia dyskusji uzyskanych wyników odnosząc się do wcześniej zdobytej wiedzy z zakresu nauk chemicznych oraz pokrewnych dyscyplin naukowych (K\_U02, K\_U04).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Ocena zachowania studenta pod kątem dostrzegania korzyści z wykorzystania metod komputerowych w kontekście społecznym i ekonomicznym (K\_K06); rozumienia potrzeby dalszego kształcenia się (K\_K01); kreatywności w pracy w grupie (K\_K02).

**Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi****A. Wymagania formalne**

chemia ogólna

**B. Wymagania wstępne**

posiadanie wiedzy podstawowej z zakresu chemii

**Cele kształcenia**

Zapoznanie studentów z zagadnieniami związanymi z mechanizmami działania chemioterapeutyków

Zapoznanie studentów z obecnym stanem wiedzy na temat strategii i metod projektowania nowych chemioterapeutyków

**Treści programowe****A. Problematyka wykładu:**

Układ patogen – gospodarz vs. selektywna toksyczność

Aktywność biologiczna i metody jej testowania

Ilościowe sposoby wyrażania aktywności biologicznej

Mechanizmy działania leków a strategie poszukiwania nowych chemioterapeutyków (cztery ery w historii leków)

Podstawy projektowanie nowych chemioterapeutyków: etapy projektowanie leków, reguła piętek Lipskiego (RO5)

Metody komputerowe w projektowaniu nowych leków: metoda Free-Wilson, metoda Hanscha, 3D-QSAR, itp..

Ekonomiczne aspekty projektowania leków (analiza rynku farmaceutycznego)

**B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:**

Ilościowe sposoby wyrażania aktywności biologicznej

Modelowanie zależności struktura – aktywność

Podstawowe techniki w modelowaniu QSAR

Przegląd gotowych modeli projektowanie nowych leków komercyjnie dostępnych na rynku.

**Wykaz literatury****A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):****A.1. wykorzystywana podczas zajęć**

Instrukcje do ćwiczeń przygotowywane przez prowadzących zajęcia.

**B. Literatura uzupełniająca:**

J. Mazerski, „Podstawy chemometrii”, Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, Gdańsk, 2000.

J. Xiong, „Podstawy bioinformatyki”, Wydawnictwo Uniwersytetu Warszawskiego, 2009.

R. B. Silverman, „Chemia organiczna w projektowaniu leków”, WNT, Warszawa, 2004.

Bieżące publikacje naukowe oraz opracowania i artykuły przeglądowe.

**Kierunkowe efekty uczenia się**

K\_W06 - stosuje matematykę w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o pogłębionym poziomie złożoności

K\_W07 - dobiera techniki eksperymentalne oraz teoretyczne w zakresie niezbędnym do zrozumienia, opisu i modelowania procesów chemicznych o wyższym stopniu złożoności

K\_W08 - wykazuje się pogłębioną znajomością teoretycznych metod obliczeniowych i informatycznych stosowanych do rozwiązywania problemów z chemii

K\_W10 - operuje wiedzą dotyczącą zasad działania aparatury naukowo-badawczej stosowanej w chemii

**Wiedza**

Po ukończeniu kursu każdy student:

wie jakie są podstawowe mechanizmy działania chemioterapeutyków

wie na czym polega projektowania nowych leków

zna podstawowe komputerowe metody wykorzystywane w projektowaniu leków

wymieni główne wyzwania stojące przed metodami (Q)SAR;

**Umiejętności**

Po ukończeniu kursu każdy student:

potrafi samodzielnie zbudować prosty model (Q)SAR, poprawnie przeprowadzić jego walidację oraz wykonać predykcję zmiennej zależnej na podstawie wartości deskryptorów struktury;

krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania i jest w stanie odnieść je do panujących obecnie przepisów.

|   |  |
|---|--|
| <p>K_U01 – planuje i realizuje eksperymenty chemiczne o pogłębionym stopniu złożoności</p> <p>K_U02 – krytycznie ocenia wyniki przeprowadzanych eksperymentów, dokonywanych obserwacji i obliczeń teoretycznych, a także dyskutuje błędy</p> <p>K_U04 – stosuje zdobytą wiedzę z chemii oraz pokrewnych dyscyplin naukowych</p> <p>K_K01 – zna ograniczenia własnej wiedzy, rozumie konieczność dalszego kształcenia się i potrafi inspirować do tego inne osoby</p> <p>K_K02 – pracuje w zespole przyjmując w nim różne role</p> <p>K_K06 – w sposób świadomy i odpowiedzialny podejmuje się realizacji zadań badawczych, rozumiejąc społeczne aspekty praktycznego zastosowania zdobytej wiedzy i umiejętności oraz związaną z tym odpowiedzialność</p> | <p><b>Kompetencje społeczne (postawy)</b></p> <p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <p>dostrzega korzyści z wykorzystania metod komputerowych w kontekście społecznym (poprawa jakości życia społeczeństwa), etycznym (zmniejszenie liczby badań przeprowadzanych na zwierzętach) i ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań);</p> <p>rozumie potrzebę dalszego kształcenia się;</p> <p>wykazuje kreatywność w pracy grupie;</p> <p>wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę.</p> |
| <p><b>Kontakt</b></p> <p>karolina.jagello@ug.edu.pl</p>   |  |