


**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, chemia i technologia środowiska, analityka i
		specjalnościowy	diagnostyka chemiczna, chemia obliczeniowa
		specjalizacja	wszystkie
<b>Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)</b>			
dr inż. Karolina Jagiełło; Sattibabu Merugu; Filip Stoliński			
<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>			
2023/2024 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: •zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi Ćwiczenia laboratoryjne: •wykonywanie zestawu ćwiczeń w sali komputerowej oraz pisemna prezentacja uzyskanych wyników po każdym ćwiczeniu (sprawozdania), •ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych.	
		<b>Podstawowe kryteria oceny</b>	
		Wykład: 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. Ćwiczenia laboratoryjne: Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych ćwiczeń Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia. 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 piątek 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>	