


KAPITAŁ LUDZKI
 NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

 Projekt współfinansowany przez
 Unię Europejską w ramach
 Europejskiego Funduszu
 Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
 EUROPEJSKI
 FUNDUSZ SPOŁECZNY


Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Wstęp do projektowania leków małocząsteczkowych		13.3.1398	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki	Bioinformatyka	forma	stacjonarne
		moduł	Podstawowa
		specjalnościowy	Podstawowa
		specjalizacja	Podstawowa
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
dr inż. Karolina Jagiełło; Klaudia Chmielewska; dr hab. Krzesimir Ciura			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3 Przedmiot w wymiarze 30h ćwiczeń w pomieszczeniu dydaktycznym + praca własna	
Ćw. laboratoryjne			
Sposób realizacji zajęć			
zajęcia w sali dydaktycznej			
Liczba godzin			
Ćw. laboratoryjne: 30 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2025/2026 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
ćwiczenia laboratoryjne w pomieszczeniu dydaktycznym, praca własna - realizacja projektów w domu		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		wykonanie pracy zaliczeniowej - projekt lub prezentacja	
		Podstawowe kryteria oceny	
		1. Kryterium niezbędnym do zaliczenia przedmiotu jest aktywne uczestnictwo w prowadzonych zajęciach. Podczas zajęć, treść programowa zostanie przekazana w formie wykładu. Ponadto student samodzielnie wykona szereg zadań powierzonych mu przez prowadzącego zajęcia.	
		2. Podstawą zaliczenia przedmiotu jest samodzielne wykonanie zadań powierzonych przez prowadzącego i zaprezentowanie wyników z dyskusją w postaci pracy zaliczeniowej (projektu lub prezentacji).	
Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się			

zakładany efekt uczenia się	Konwersatorium	kolokwium	sprawozdanie	egzamin pisemny	egzamin ustny
	Wiedza				
	Umiejętności				
KU_02	+				
KU_05	+				
Kompetencje					
KS_03	+				

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

1. Chemia bioorganiczna
2. Metody matematyczne bioinformatyki - analiza wektorowa
3. Python z podstawami algorytmiki
4. Techniki eksploracji danych wielowymiarowych
5. Uczenie maszynowe
6. Elementy chemii obliczeniowej w praktyce

B. Wymagania wstępne

brak

Cele kształcenia

Zapoznanie studentów z zagadnieniami związanymi z mechanizmami działania leków

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

Treści programowe

1. Układ patogen – gospodarz vs. selektywna toksyczność
2. Aktywność biologiczna i metody jej testowania
3. Ilościowe sposoby wyrażania aktywności biologicznej
4. Mechanizmy działania leków a strategie poszukiwania nowych chemioterapeutyków (cztery ery w historii leków)
5. Podstawy projektowanie nowych chemioterapeutyków: etapy projektowanie leków, reguła piętek Lipinskiego (RO5)
6. Metody komputerowe w projektowaniu nowych leków: metoda Free-Wilson, metoda Hanscha, 3D-QSAR, itp.
7. Ekonomiczne aspekty projektowania leków (analiza rynku farmaceutycznego)

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć: R. B. Silverman, „Chemia organiczna w projektowaniu leków”, WNT, Warszawa, 2004.

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta: Bieżące publikacje naukowe oraz opracowania i artykuły przeglądowe

B. Literatura uzupełniająca

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

Kierunkowe efekty uczenia się

KU_02 Potrafi zastosować wiedzę z nauk przyrodniczych i ścisłych do formułowania, analizowania i rozwiązywania problemów związanych z bioinformatyką

KU_05 Posiada umiejętność korzystania z informacji naukowej, w tym angielskojęzycznej, dotyczącej bioinformatyki; wykorzystuje źródła elektroniczne; posiada podstawową umiejętność korzystania z właściwych baz danych

KS_03 Posiada świadomość i zrozumienie zagrożeń oraz dylematów, w tym dylematów etycznych, związanych z prowadzeniem badań naukowych oraz wprowadzaniem zaawansowanych technologii; rozumie i docenia znaczenie własności intelektualnej; postępuje etycznie

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. wie jakie są podstawowe mechanizmy działania chemioterapeutyków
2. wie na czym polega projektowania nowych leków
3. zna podstawowe komputerowe metody wykorzystywane w projektowaniu leków

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:

potrafi samodzielnie zbudować prosty model komputerowy umożliwiający projektowanie nowych leków, poprawnie przeprowadzić jego walidację oraz wykonać predykcję zmiennej zależnej na podstawie wartości deskryptorów

struktury;

Kompetencje społeczne (postawy)

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. 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);
2. rozumie potrzebę dalszego kształcenia się;
3. wykazuje kreatywność w pracy grupie;
4. wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę.

Kontakt

karolina.jagiello@ug.edu.pl