

CORSO DI STUDIO **BIOTECNOLOGIE INDUSTRIALI E FARMACEUTICHE**

ANNO ACCADEMICO **2023-2024**

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO **PROGETTAZIONE E SVILUPPO DEL FARMACO**

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	2023-2024
Periodo di erogazione	1° ANNO, 2° SEMESTRE (04.03.2024-14.06.2024)
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	6 CFU (5 CFU lezioni frontali e 1 CFU esercitazioni)
SSD	CHIM/08 – Chimica Farmaceutica
Lingua di erogazione	Italiana
Modalità di frequenza	Facoltativa

Docente	
Nome e cognome	Cosimo Damiano Altomare
Indirizzo mail	cosimodamiano.altomare@uniba.it
Telefono	+39 080 5442781
Sede	Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco, stanza n. 225, 1° piano
Sede virtuale	Codice Teams: uai135j
Ricevimento	Tutti i giorni (ore 15-17), previo appuntamento via email

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
150	40	15	95
CFU/ETCS			
6	5	1	

Obiettivi formativi	Fornire le conoscenze di base sulla progettazione dei farmaci e sulle relazioni struttura attività
Prerequisiti	Chimica generale, chimica organica, farmacologia.
Metodi didattici	Lezioni frontali integrate da esercitazioni in aula.

Risultati di apprendimento previsti	
DD1 Conoscenza e capacità di comprensione	<i>Acquisizione dei metodi di base per la progettazione di molecole di interesse farmacologico o diagnostico</i>
DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate	<i>Utilizzazione di metodologie e piattaforme tecnologiche specifiche (modellistica molecolare) per l'identificazione di bersagli molecolari di interesse biotecnologico.</i>
DD3-5 Competenze trasversali	<ul style="list-style-type: none"> - <i>Capacità di giudizio critico</i> - <i>Capacità espositiva</i> - <i>Capacità di studio autonomo</i>
Contenuti di insegnamento (Programma)	Interazioni fondamentali tra molecole. Forze di van der Waals. Effetto idrofobico. Interazioni ioniche. Interazioni dipolari. Descrittori molecolari 1D, 2D e 3D. Relazione Quantitativa Struttura-Attività/Proprietà. Rappresentazione e catalogazione molecolare 1D, 2D e 3D. Ricerche in database. Similarità e diversità molecolare. Analisi in componenti principali, analisi cluster, algoritmi genetici, tecniche di ottimizzazione multiobiettivo. Disegno sperimentale. Dominio di applicabilità. Elementi di tossicologia predittiva. Modelli di farmacoforo. Modelli QSAR. Equazione di Hansch. Equazione Free-Wilson. Craig Plot, CoMFA, GRID. Meccanica molecolare. Analisi Conformazionale. Struttura tridimensionale di proteine e sito attivo. Protein Data Bank, Interazione Proteina-Molecola, Docking molecolare. Dinamica molecolare. Progettazione de novo. Virtual screening.
Testi di riferimento	<ul style="list-style-type: none"> • R. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Pearson Education EMA • Graham L. Patrick; Introduzione alla Chimica farmaceutica (EdiSES)
Note ai testi di riferimento	
Materiali didattici	<i>Slides di lezioni ed esercitazioni reperibili in Classe Teams</i>
Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	<i>Colloquio orale</i>
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</i> • <i>Autonomia di giudizio</i> • <i>Abilità comunicative</i> • <i>Capacità di apprendere</i>
Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	<i>Il voto finale terrà conto dei criteri di valutazione sopra elencati.</i>
Altro	
	.

COURSE OF STUDY *INDUSTRIAL AND PHARMACEUTICAL BIOTECHNOLOGIES*
ACADEMICI YEAR *2023-2024*
ACADEMIC SUBJECT *DRUG DESIGN AND DEVELOPMENT*

General information	
Year of the course	2023-2024
Academic calendar (starting and ending date)	1st Year, 2nd semester (04.03.2024-14.06.2024)
Credits (CFU/ETCS):	6 CFU (5 CFU lectures and 1 CFU exercises)
SSD	CHIM/08 – Medicinal Chemistry
Language	Italian
Mode of attendance	Optional

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Cosimo Damiano Altomare
E-mail	cosimodamiano.altomare@uniba.it
Telephone	+39 080 5442781
Department and address	Department of Pharmacy-Pharmaceutical Sciences, room n. 225, 1 st floor
Virtual room	Teams code: uai135j
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	Online or onside by appointment (15-17 h)

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
150	40	15	95
CFU/ETCS			
6	5	1	

Learning Objectives	Learning about main methods for the design of molecules of pharmacological or diagnostic interest.
Course prerequisites	Inorganic and organic chemistry, pharmacology

Teaching strategies	
Expected learning outcomes in terms of	
Knowledge and understanding on:	Learning about the main strategies and methods of design of molecules of pharmacological or diagnostic interest.
Applying knowledge and understanding on:	Use of specific technological platforms (molecular modeling) for the identification of molecular targets of biotechnological
Soft skills	<ul style="list-style-type: none"> • Making informed judgments and choices • Communicating knowledge and understanding • Capacities to continue learning

Syllabus	
Content knowledge	<i>Fundamental interactions between molecules. Van der Waals forces. Hydrophobic effect. Ionic interactions. Dipolar interactions. 1D, 2D and 3D molecular descriptors. Quantitative Structure-Activity / Property Relationship. 1D, 2D and 3D molecular representation. Database searching. Similarity and molecular diversity. Principal component analysis, cluster analysis, genetic algorithms, multi-objective optimization techniques. Experimental design. Applicability domains. Basic of predictive toxicology. Pharmacophore models. QSAR models. Hansch equation. Free-Wilson equation. Craig Plot, CoMFA, GRID. Molecular mechanics. Conformational Analysis. Three-dimensional structure of proteins and active site. Protein Data Bank, Protein-Molecule Interaction, Molecular Docking. Molecular dynamics. De novo design. Virtual screening.</i>
Texts and readings	<ul style="list-style-type: none"> • R. Leach, Molecular Modelling: Principles and Applications, Pearson Education EMA • Graham L. Patrick; Introduzione alla Chimica farmaceutica (EdiSES)
Notes, additional materials	Lecture and exercises slides
Repository	
Assessment	
Assessment methods	<i>Interview</i>
Assessment criteria	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Knowledge and understanding</i> • <i>Applying knowledge and understanding</i> • <i>Autonomy of judgment</i> • <i>Communicating knowledge and understanding</i> • <i>Communication skills</i> • <i>Capacities to continue learning</i>
Final exam and grading criteria	<i>The final score will account of the evaluation criteria above mentioned.</i>
Further information	