

CORSO DI STUDIO *Biotecnologie Mediche e Farmaceutiche*

ANNO ACCADEMICO *2023-2024*

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO *Chimica Farmaceutica (Medicinal
Chemistry, 8 CFU)*

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	<i>III</i>
Periodo di erogazione	<i>II semestre (04.03.24-14.06.24)</i>
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	<i>8</i>
SSD	<i>Chimica Farmaceutica – CHIM08</i>
Lingua di erogazione	<i>Italiana</i>
Modalità di frequenza	<i>Facoltativa</i>

Docente	
Nome e cognome	<i>Paolo Tortorella</i>
Indirizzo mail	<i>paolo.tortorella@uniba.it</i>
Telefono	<i>+39 080 5442735</i>
Sede	<i>Dipartimento di Farmacia-Scienze del Farmaco</i>
Sede virtuale	<i>Codice Teams: 630ry60</i>
Ricevimento	<i>Martedì e giovedì 16.00-17.00 in presenza</i>

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
<i>200</i>	<i>56</i>	<i>12</i>	<i>132</i>
CFU/ETCS			
<i>8</i>	<i>7</i>	<i>1</i>	

Obiettivi formativi	Obiettivo formativo del corso è quello di spiegare le relazioni che legano la struttura chimica dei farmaci alla loro attività farmacologica attraverso lo studio delle proprietà chimico-fisiche, stereo-elettroniche e del meccanismo d'azione.
Prerequisiti	Conoscenze di base di Chimica Organica.

<p>Metodi didattici</p>	<p><i>Didattica frontale: le lezioni saranno svolte mediante presentazioni di slide precedentemente fornite agli studenti e mediante l'uso di software di visualizzazione molecolare.</i></p> <p><i>Laboratorio/Esercitazioni: verranno discussi casi studio e quiz a risposta multipla sugli argomenti trattati. Alcune esercitazioni prevedono l'utilizzo di software gratuiti.</i></p>
<p>Risultati di apprendimento previsti</p> <p>DD1 Conoscenza e capacità di comprensione</p> <p>DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate</p> <p>DD3-5 Competenze trasversali</p>	<p>Descrittore di Dublino 1: alla fine del corso lo studente dovrà conoscere:</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ l'ambito di interesse della Chimica Farmaceutica (progettazione e sviluppo dei farmaci). ○ le principali sostanze bioattive di alcune classi di farmaci selezionate. ○ metabolismo dei farmaci <p>Descrittore di Dublino 2: al completamento dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà aver acquisito le competenze per:</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>riconoscere i farmaci sulla base della loro struttura;</i> ○ interpretare le proprietà chimico-fisiche dei farmaci a partire dalla loro struttura chimica. <p>Descrittore di Dublino 3</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Autonomia di giudizio</i> <p>Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di:</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ ipotizzare i possibili effetti farmacologici dei farmaci sulla base degli elementi farmacoforici individuati; ○ valutare le relazioni struttura-attività (SAR); ○ prevedere/giustificare le possibili trasformazioni metaboliche sulla base della loro struttura chimica. <p>Descrittore di Dublino 4</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Abilità comunicative</i> <p>Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di:</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ descrivere la struttura dei farmaci utilizzando correttamente un linguaggio tecnico-scientifico; ○ descrivere la farmacocinetica e la farmacodinamica dei principi attivi ed argomentare su di questi in maniera semplice, chiara e rigorosa. <p>Descrittore di Dublino 5</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i> <p>Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di:</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ orientarsi sul materiale presente in rete ed in alcuni testi per ampliare le proprie conoscenze e competenze in ambito chimico-farmaceutico

<p>Contenuti di insegnamento (Programma)</p>	<p>Parte I. PARTE GENERALE 1.1 Chimica Farmaceutica: definizione ed obiettivi 1.2 La nomenclatura dei farmaci. 1.3 Proprietà molecolari 1.4 Grafica molecolare: visualizzazione 3D di piccole molecole e di proteine. Rappresentazione dei volumi e delle superfici molecolari 1.5 Proprietà chimico-fisiche dei farmaci. 1.6 Farmacocinetica.</p> <p>Parte II. I BERSAGLI PER L'AZIONE DEI FARMACI 2.1 Perché e dove agiscono i farmaci: le interazioni con le macromolecole biologiche 2.2 Gli enzimi: il sito attivo di un enzima, legame del substrato al sito attivo, uso degli inibitori enzimatici in medicina. 2.3 I recettori: agonisti ed antagonisti recettoriali. 2.4 Gli acidi nucleici: agenti intercalanti, agenti alchilanti, farmaci che agiscono tramite tagli della catena</p> <p>Parte III. PROGETTAZIONE E SVILUPPO DEL FARMACO 3.1 Scoperta e sviluppo dei farmaci: identificazione del target, identificazione del prototipo 3.2 Energia molecolare ed analisi conformazionale 3.3 Progettazione di farmaci ed interazioni farmaco recettore: approccio basato sulla struttura del farmaco ed approccio basato sulla struttura del recettore 3.4 Docking. 3.5 Analisi SAR, QSAR e 3D-QSAR</p> <p>Parte IV. DESCRIZIONE DI ALCUNE CLASSI DI FARMACI 4.1 Agenti antibatterici: solfonammidi, penicilline e cefalosporine 4.2 Farmaci del sistema colinergico. 4.3 Farmaci del sistema adrenergico. 4.4 Antinfiammatori non steroidei. 4.5 Analgesici dell'oppio. 4.6 Antiulcera.</p> <p>Parte V. ESERCITAZIONE 5.1 Visualizzazione di complessi proteina/ligando. 5.2 Determinazione dei principali parametri farmacocinetici; 5.3 Docking.</p>
<p>Testi di riferimento</p>	<ul style="list-style-type: none"> ○ Patrick G.L. Introduzione alla Chimica Farmaceutica – III ed. – Edises ○ Gasco A. Chimica Farmaceutica- II ed - Zanichelli ○ Foye's' Principi di Chimica Farmaceutica - VII ediz. italiana - Piccin. ○ Wermuth C. The Practice of Medicinal Chemistry - 4th ed. Academic Press
<p>Note ai testi di riferimento</p>	
<p>Materiali didattici</p>	<p>Diapositive del corso disponibili sul canale Teams dell'insegnamento</p>
<p>Valutazione</p>	
<p>Modalità di verifica dell'apprendimento</p>	<p>L'esame prevede una prova orale finalizzata ad accertare il livello di conoscenza e capacità di comprensione raggiunto dallo studente relativamente ai contenuti teorici indicati nel programma. Si valuterà inoltre la capacità espositiva, l'autonomia di giudizio, il ragionamento critico e la capacità di collegare tra loro gli argomenti trattati.</p>

<p>Criteri di valutazione</p>	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Adeguata conoscenza delle principali classi dei farmaci; • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Adeguata capacità di valutare il profilo chimico-fisico di un farmaco sulla base dei gruppi funzionali riconosciuti e le implicazioni biofarmaceutiche e farmacocinetiche; • <i>Autonomia di giudizio:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Capacità di rappresentare correttamente la struttura dei farmaci ai fini del riconoscimento della classe di appartenenza, le SAR corrispondenti ed i probabili metaboliti. • <i>Abilità comunicative:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Capacità di descrivere la struttura dei farmaci utilizzando correttamente il gergo chimico-farmaceutico; ○ Capacità di descrivere la farmacocinetica e la farmacodinamica dei principi attivi ed argomentare su questi in maniera semplice, chiara e rigorosa. • <i>Capacità di apprendere:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Capacità di operare collegamenti nell'ambito dei contenuti del corso e degli insegnamenti affini.
<p>Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p><i>Il voto finale è attribuito in trentesimi. L'esame si intende superato quando il voto è maggiore o uguale a 18.</i></p>
<p>ALTRO</p>	

COURSE OF STUDY: Medical and Pharmaceutical Biotechnologies
ACADEMIC YEAR: 2023/2024
ACADEMIC SUBJECT: Medicinal Chemistry, 8 CFU

General information	
Year of the course	III
Academic calendar (starting and ending date)	II semestre (04.03.24-14.06.24)
Credits (CFU/ETCS):	8
SSD	CHIM/08
Language	Italian
Mode of attendance	Optional

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Paolo Tortorella
E-mail	paolo.tortorella@uniba.it
Telephone	+39 080 5442735
Department and address	Department of Pharmacy-Pharmaceutical Sciences – University Campus – Via Orabona 4
Virtual room	Teams: 630ry60
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	Reception by email appointment

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
200	56	12	132
CFU/ETCS			
8	7	1	

Learning Objectives	The learning objectives of the course is to explain the relationships between chemical structure of drugs and their pharmacological activity through the study of their chemical-physical, stereo-electronic properties and mechanism of action.
Course prerequisites	Basic Knowledge of organic chemistry

Teaching strategie	Frontal teaching: the lessons will be carried out through slide presentations previously provided to the students and the use of molecular visualization software. Laboratory/practices: case studies and multiple-choice quizzes on the topics covered will be discussed. Some tutorials involve the use of free software.
Expected learning outcomes in terms of	
Knowledge and understanding on:	At the end of the course student will acquire knowledge in: <ul style="list-style-type: none"> ○ field of interest of Medicinal Chemistry (design and development of drugs) ○ major bioactive substances of a few selected drug classes ○ drug metabolism
Applying knowledge and understanding on:	At the end of the course, the student must have acquired the skills to: <ul style="list-style-type: none"> ○ recognize drugs based on their structures. ○ analyze chemical-physical properties of drugs starting from their chemical structure.

Soft skills	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Making informed judgments and choices</i> At the end of the course the student should be able to: <ul style="list-style-type: none"> ○ deduces possible pharmacological effects of drugs based on the identified pharmacophore elements. ○ evaluates structure-activity relationships (SAR); ○ predicts possible metabolic transformations based on chemical structure of drugs. • <i>Communicating knowledge and understanding</i> At the end of the course student should be able to: <ul style="list-style-type: none"> ○ describe structure of drugs correctly using technical-scientific language. ○ describe pharmacokinetics and pharmacodynamics of drugs and discuss them in a simple, clear, and rigorous way. • <i>Capacities to continue learning</i> At the end of the course student should be able to: <ul style="list-style-type: none"> ○ Reading and understanding material present on the web and in some texts to expand their knowledge and skills in the chemical-pharmaceutical field.
--------------------	---

Syllabus	
Content knowledge	<p>Part A Drugs and drug targets - an overview</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Medicinal Chemistry: overview 2. Molecular properties 3. Molecular graphics 4. Pharmacokinetics <p>Part B Drug targets</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Enzymes as drug targets 2. Receptors as drug targets 3. Nucleic acids as drug targets <p>Part C Drug discovery, design, and development</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Drug discovery: finding a lead 2. Drug design: optimizing target interactions 3. Drug design: optimizing access to the target 4. Getting the drug to market 5. Conformational Analysis 6. Pharmacophore-Based Design 7. Receptor-Based Design 8. Docking. 9. SAR, QSAR and 3D-QSAR <p>Part E Selected topics in medicinal chemistry</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Antibacterial agents 2. Cholinergics, anticholinergics, and anticholinesterases 3. Drugs acting on the adrenergic nervous system 4. Nonsteroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) 5. Opioid analgesics 6. Antiulcer agent <p>Part F Laboratory activities</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Protein/ligand complex 2. Docking; 3. Swissadme
Texts and readings	<ul style="list-style-type: none"> ○ Patrick G.L. Introduzione alla Chimica Farmaceutica – III ed. – EdiSES ○ Gasco A. Chimica Farmaceutica- II ed - Zanichelli ○ Foye's' Principi di Chimica Farmaceutica - VII ediz. italiana - Piccin. ○ Wermuth C. The Practice of Medicinal Chemistry - 4th ed. Academic Press
Notes, additional materials	
Repository	Teaching material will be available through Teams class.

Assessment	
Assessment methods	The exam includes an oral test aimed at ascertaining the level of knowledge and understanding achieved by the student in relation to the theoretical contents indicated in the program. Presentation skills, independent judgement, critical reasoning and the ability to connect the topics covered will also be assessed.
Assessment criteria	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Knowledge and understanding</i> <ul style="list-style-type: none"> o knowledge of the main classes of drugs; • <i>Applying knowledge and understanding</i> <ul style="list-style-type: none"> o evaluate the chemical-physical profile of a drug on the basis of their functional groups and discuss biopharmaceutical and pharmacokinetic implications. • <i>Autonomy of judgment</i> <ul style="list-style-type: none"> o correctly represent structure of drugs to recognizing the class they belong to, the corresponding SAR and probable metabolites. • <i>Communication skills</i> <ul style="list-style-type: none"> o Ability to describe the structure of drugs. o Ability to describe pharmacokinetics and pharmacodynamics of drugs. • <i>Capacities to continue learning</i> <ul style="list-style-type: none"> o Ability to make connections within the course contents and related courses.
Final exam and grading criteria	The final grade is awarded out of thirty, based on knowledge and understanding. The exam is passed when the grade is greater than or equal to 18. To achieve a high evaluation, the student must have developed autonomy of judgment and adequate capacity for argumentation and presentation.
Further information	
	.