

Arkusz opisu przedmiotu

1. INFORMACJE PODSTAWOWE	
Dziedzina naukowa	Nauki medyczne i nauki o zdrowiu
Dyscyplina naukowa	<input type="checkbox"/> nauki medyczne <input checked="" type="checkbox"/> nauki farmaceutyczne
Nazwa przedmiotu	Techniki in silico w projektowaniu nowych leków.
Moduł kształcenia	<input type="checkbox"/> podstawowy <input checked="" type="checkbox"/> specjalistyczny <input type="checkbox"/> umiejętności miękkich
Rok studiów	<input type="checkbox"/> I <input checked="" type="checkbox"/> II <input type="checkbox"/> III <input type="checkbox"/> IV
Semestr	<input checked="" type="checkbox"/> zimowy <input type="checkbox"/> letni
Wymiar godzinowy	6
Wykład	
Ćwiczenia	6
Konwersatorium	
Koordynator kursu	Dr hab. Sabina Podlewska
Prowadzący zajęcia	Dr hab. Sabina Podlewska
Język wykładowy	Angielski lub Polski
Warunki zaliczenia	Realizacja projektu badawczego
2. EFEKTY UCZENIA 8PRK	
Symbol i numer przedmiotowego efektu uczenia się	Efekty uczenia się (w razie potrzeby zmodyfikować liczbę wierszy w poszczególnych kategoriach)
wiedza	
EU3 (P8S_WG)	Doktorant zna i rozumie metodologię badań naukowych
EU2 (P8S_WG)	Doktorant zna i rozumie główne tendencje rozwojowe dyscyplin naukowych, w których odbywa się kształcenie
umiejętności	
EU8 (P8S_UW)	Doktorant potrafi wykorzystywać wiedzę z różnych dziedzin nauki do twórczego identyfikowania, formułowania i innowacyjnego rozwiązywania złożonych problemów o charakterze badawczym, a w szczególności: definiować cel i przedmiot badań naukowych, formułować hipotezę badawczą; rozwijać metody, techniki i narzędzia badawcze oraz twórczo je stosować; wnioskować na podstawie wyników badań naukowych; dokonywać krytycznej analizy i oceny wyników badań naukowych, działalności eksperckiej i innych prac o charakterze twórczym oraz ich wkładu w rozwój wiedzy; transferować wyniki działalności naukowej do sfery gospodarczej i społecznej
EU13 (P8S_UO)	Doktorant potrafi planować i realizować indywidualne i zespołowe przedsięwzięcia badawcze lub twórcze, także w środowisku międzynarodowym
kompetencje społeczne	
EU15 (P8S_KK)	Doktorant jest gotów do krytycznej oceny dorobku w ramach danej dyscypliny naukowej, krytycznej oceny własnego wkładu w rozwój dyscypliny, uznawania znaczenia wiedzy w rozwiązywaniu problemów poznawczych i praktycznych.
3. TREŚCI PROGRAMOWE	
Cele przedmiotu	(w razie potrzeby zmodyfikować liczbę wierszy)
O1	Zapoznanie doktorantów z podstawowymi metodami modelowania molekularnego wykorzystywanych w procesie projektowania leków, takich jak modelowanie farmakoforowe, dokowanie, poszukiwanie nowych aktywnych związków w oparciu o analizę podobieństwa strukturalnego do znanych ligandów
O2	Zapoznanie doktorantów z podstawowymi bazami danych wykorzystywanymi w procesie poszukiwania nowych związków biologicznie aktywnych

Opis przedmiotu (max 150 słów)	Kurs w formie ćwiczeń praktycznych, podczas których doktoranci zapoznają się z podstawowymi narzędziami obliczeniowymi wykorzystywanymi w procesie projektowania leków, obejmujący w szczególności: 1. Naukę przygotowania kompleksowego zestawu danych odnośnie określonego celu biologicznego (zapoznanie z bazami ChEMBL, DrugBank, GPCRdb, ZINC). 2. Opracowanie modelu farmakoforowego ligandów danego receptora. 3. Przeprowadzenie poszukiwania kandydatów na nowe ligandy w oparciu o analizę podobieństwa strukturalnego do znanych związków aktywnych danego receptora. 4. Przeprowadzenie procedury dokowania wraz z analizą jego wyników. 5. Projektowanie protokołu wirtualnego skriningu do poszukiwania nowych kandydatów na leki w komercyjnie dostępnych bazach związków.
Wymagania wstępne	Brak
Literatura podstawowa (max.2 pozycje)	<ol style="list-style-type: none">1. Vemula D, Jayasurya P, Sushmitha V, Kumar YN, Bhandari V. CADD, AI and ML in drug discovery: A comprehensive review. <i>Eur. J. Pharm. Sci.</i> 2023, <i>181</i>, 106324.2. Katsila T, Spyroulias GA, Patrinos GP, Matsoukas MT. Computational approaches in target identification and drug discovery. <i>Comput. Struct. Biotechnol. J.</i> 2016, <i>14</i>, 177-184
Literatura uzupełniająca (max.2 pozycje)	<ol style="list-style-type: none">1. Jorgensen WL. The many roles of computation in drug discovery. <i>Science.</i> 2004, <i>303(5665)</i>, 813-1818.
4. INFORMACJE DODATKOWE	
Limit miejsc: 3 osoby	

Course description sheet

1. BASIC INFORMATION	
Field of Science	Medical and Health Sciences
Discipline	<input type="checkbox"/> medical sciences <input checked="" type="checkbox"/> pharmacology and pharmacy
Course name	In silico techniques in the design of new drugs
Teaching module	<input type="checkbox"/> basic <input checked="" type="checkbox"/> specialized <input type="checkbox"/> soft skills
Year of study	<input type="checkbox"/> I <input checked="" type="checkbox"/> II <input type="checkbox"/> III <input type="checkbox"/> IV
Semester	<input checked="" type="checkbox"/> winter <input type="checkbox"/> summer
Number of hours	6
Lecture	
Workshop	6
Seminar	
Course coordinator	Dr hab. Sabina Podlewska
Lecturer	Dr hab. Sabina Podlewska
Lecture language	English or Polish
Course completion requirements	Research project implementation
2. LEARNING OUTCOMES 8PRK	
Learning outcome symbol	Learning outcome name (modify the number of rows in each category if necessary)
Knowledge	
EU3 (P8S_WG)	A PhD student knows and understands methodology of scientific research
EU2 (P8S_WG)	A PhD student knows and understands main development trends in the scientific disciplines in which training is provided
skills	
EU8 (P8S_WG)	A PhD student is able to use the knowledge from various areas of science for creative identification, formulation and innovative handling of complex research problems, as well as – specifically – define the purpose and subject of scientific research, formulate research assumptions, develop research methods, techniques and tools and creatively use these; draw conclusions based on the output of scientific research; perform critical analysis and evaluation of research output, expert activity and other work of creative nature and its contribution into the development of knowledge; transfer the output of scientific activity to business and social domains
EU13 (P8S_WG)	A PhD student is able to plan and implement – both individually and as part of a team – research and creative projects, also in an international environment
social competences	
EU15 (P8S_KK)	A PhD student is prepared to critically review the body of work within a given scientific discipline, critically review his/her own contribution into the development of the discipline, recognize the importance of knowledge in addressing problems of cognitive and practical nature
3. STUDY CONTENT	
Course objectives	(modify the number of rows if necessary)
O1	Familiarizing PhD students with basic molecular modeling methods used in the drug design process, such as pharmacophore modeling, docking, and searching for new active compounds based on the analysis of structural similarity to known ligands

O2	Familiarizing PhD students with main databases used in the process of searching for new biologically active compounds
Course description (max 150 words)	A course in the form of practical exercises, during which PhD students will become familiar with basic computational tools used in the drug design process, including in particular: <ol style="list-style-type: none"> 1. Learning how to prepare a comprehensive dataset regarding a specific biological target (familiarization with the ChEMBL, DrugBank, GPCRdb, ZINC databases). 2. Development of a pharmacophore model of ligands of a given receptor. 3. Conducting a search for candidates for new ligands based on the analysis of structural similarity to known active compounds of a given receptor. 4. Conducting the docking procedure together with the analysis of its results. 5. Designing a virtual screening protocol for searching for new drug candidates in commercially available compound databases.
Prerequisites	None
Primary literature (max.2 items)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Vemula D, Jayasurya P, Sushmitha V, Kumar YN, Bhandari V. CADD, AI and ML in drug discovery: A comprehensive review. <i>Eur. J. Pharm. Sci.</i> 2023, <i>181</i>, 106324. 2. Katsila T, Spyroulias GA, Patrinos GP, Matsoukas MT. Computational approaches in target identification and drug discovery. <i>Comput. Struct. Biotechnol. J.</i> 2016, <i>14</i>, 177-184
Complementary literature (max.2 items)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Jorgensen WL. The many roles of computation in drug discovery. <i>Science.</i> 2004, <i>303(5665)</i>, 813-1818.
4. ADDITIONAL INFORMATION	
Limit of places: 3	