

# Testi del Syllabus

Resp. Did.	<b>DE LUCA LAURA</b>	<b>Matricola: 015124</b>
Docente	<b>DE LUCA LAURA, 6 CFU</b>	
Anno offerta:	<b>2025/2026</b>	
Insegnamento:	<b>A002875 - CHIMICA FARMACEUTICA GENERALE</b>	
Corso di studio:	<b>7026 - CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE</b>	
Anno regolamento:	<b>2023</b>	
CFU:	<b>6</b>	
Anno corso:	<b>3</b>	
Periodo:	<b>PRIMO SEMESTRE</b>	



## Testi in italiano

<b>Lingua insegnamento</b>	ITALIANO
<b>Contenuti</b>	<p>Obiettivi, sviluppo storico della "Chimica Farmaceutica". Nomenclatura e classificazione dei farmaci. Il ruolo della Farmacocinetica e Farmacodinamica nei processi di drug discovery. Aspetti chimico-farmaceutici della fase Farmacocinetica: concetto di biodisponibilità di un farmaco; assorbimento dei farmaci; teoria della ripartizione in funzione del pH; distribuzione ed eliminazione. Reazioni di funzionalizzazione e Reazioni di coniugazione nel Metabolismo dei farmaci (fase I e fase II). Ruolo della stabilità metabolica nella fase di progettazione dei farmaci. Structural-alerts e tossicità. Predizione in silico delle proprietà farmacocinetiche. Aspetti chimico-farmaceutici della fase Farmacodinamica. Bersagli dei farmaci: identificazione e validazione. Interazioni chimiche nel legame farmaco-target biologico e ruolo dei gruppi funzionali sull'attività biologica. Interazione farmaco-enzima: Inibitori e attivatori enzimatici e promotori di degradazione enzimatica. Farmaci PROTAC. Inibizione enzimatica con meccanismo suicida. Interazione farmaco-recettore e Teorie recettoriali. Agonisti, agonisti parziali, antagonisti, agonisti inversi. Ligandi recettoriali competitivi, noncompetitivi, allosterici. Farmaci multitarget. Farmaci duali ad interazione "bitopic". Sfruttamento delle interazioni proteina-proteina nello sviluppo di agenti terapeutici. Progettazione di farmaci: individuazione di un hit compound; strategie e modificazioni molecolari per l'ottimizzazione dell'hit a lead: isosteria classica e bioisosteria, complicazione e semplificazione molecolare, omologia, etc. Influenza della stereochimica sull'attività farmacologica. Profarmaci: bioprecursori e carrier-linked prodrugs. Soft-drugs e hard-drugs. Chimica Farmaceutica computazionale: Ligand-based e structure-based drug-design. Principi di interazione ligando-proteina: Docking e Dinamica molecolare. SAR, QSAR e 3D-QSAR. Internet, database e motori di ricerca in chimica farmaceutica. Impiego dell'intelligenza artificiale nel drug discovery e development</p>
<b>Testi di riferimento</b>	<p>- A.Gasco, F. Gualtieri, C. Melchiorre. Chimica Farmaceutica. Casa Editrice Ambrosiana, 2020. -Graham L. Patrick Chimica Farmaceutica. Terza Edizione EdiSES, Napoli, 2015 - G. Costantino, G. Sbardella, Chimica Farmaceutica. Edizione I/2024 EdiSES, Napoli, 2024</p>

<b>Obiettivi formativi</b>	Obiettivo del corso è fornire allo studente la conoscenza dei principi di chimica farmaceutica, delle basi chimiche per la comprensione del meccanismo molecolare dell'azione di un farmaco, con particolare riguardo alla comprensione delle proprietà chimico-fisiche, dei processi di biotrasformazione, delle interazioni farmaco-bersaglio molecolare. Lo studente inoltre dovrà conoscere e comprendere le metodologie avanzate di drug design per la fase di ricerca e sviluppo di nuovi farmaci così come nella definizione di processi di interazione molecolare.
<b>Prerequisiti</b>	Lo studente deve possedere conoscenze di chimica organica e di biochimica Propedeuticità: Chimica organica I, Biochimica e biochimica applicata.
<b>Metodi didattici</b>	Lezioni frontali; Training activity di chimica farmaceutica computazionale; Strumenti a supporto della didattica PC e videoproiettore per presentazioni in Power Point. La frequenza è obbligatoria (art. 7 Regolamento Didattico del CdS). Lezioni seminariali sui metodi di modellistica molecolare per l'identificazione di hit compounds
<b>Modalità di verifica dell'apprendimento</b>	La modalità di verifica dell'apprendimento consiste in un esame orale volto ad accertare la conoscenza degli argomenti del programma del corso. La valutazione, espressa in trentesimi, tiene conto del livello di conoscenza e di approfondimento degli argomenti trattati, della capacità di valutazione critica e di formulazione di giudizi, nonché del livello dell'esposizione e della capacità di comunicazione.

## Obiettivi per lo sviluppo sostenibile

Codice	Descrizione
--------	-------------



## Testi in inglese

	Italian
	Objectives and historical development of Medicinal Chemistry. Nomenclature and classification of drugs. Pharmacokinetic and Pharmacodynamic relationships in drug discovery programs Chemical relationships of Pharmacokinetic (PK) Phase: concept of bioavailability; drug absorption; relationship between drug distribution pH; distribution and clearance. Elimination. Functionalization reactions and conjugation reactions during Drug metabolism (Phase I and phase II). Drug design and metabolic stability affecting pharmacokinetic profiles. Structural-alerts. In silico prediction of PK properties. Chemical relationships of Pharmacodynamic (PD) phase: Drug Target Discovery and Validation; Chemical interactions affecting drug/biological targets. Functional groups regulating affinity/selectivity of drugs. Drug-enzyme interaction: enzyme inhibitors, activators and degraders. PROTAC agents. Competitive, noncompetitive, allosteric enzyme inhibitors. Receptor theories. Agonists, antagonists and allosteric modulators. Multitarget agents. Dual target agents and bitopic interaction. Drugs acting as modulators of protein-protein interactions. Drug design: identification of a "hitcompound"; strategies and molecular modifications for optimization from hit to lead: isosteric and bioisosteric replacement, molecular complication and simplification, homology, etc. Influence of the stereochemistry on pharmacological activity. Design of prodrugs. Computational medicinal chemistry: Ligand-based and structure-based drug design. SAR, QSAR and 3D-QSAR methods. Theoretical calculations of ligand-protein interactions by Docking and molecular dynamic calculations. Utilizing internet databases and search engines in medicinal chemistry. Application of artificial intelligence in drug discovery and development

- A.Gasco, F. Gualtieri, C. Melchiorre. Chimica Farmaceutica. Casa Editrice Ambrosiana, 2020. -Graham L. Patrick Chimica Farmaceutica. Terza Edizione EdiSES, Napoli, 2015 - G. Costantino, G. Sbardella, Chimica Farmaceutica. Edizione I/2024 EdiSES, Napoli, 2024

The aim of the course is to provide the student with knowledge of the principles of medicinal chemistry, the chemical basis for understanding the molecular mechanism of drug action, with regard to the understanding of the chemical-physical properties, biotransformation processes, drug-molecular target interactions. The student will also have to know and understand the advanced methodologies of drug design for the research and development of new drugs as well as in the definition of molecular interaction processes.

The student must have knowledge of organic chemistry and biochemistry. Required exams: Organic chemistry I; Biochemistry and applied biochemistry

Frontal lessons; training activity in computational medicinal chemistry. Didactic equipment: video wall; Attendance is mandatory (see rules of this degree course, art. 7). Seminars on molecular modeling techniques for the identification of hit compounds

Oral examination addressed to verify the acquired knowledge and skills. The evaluation takes in to account the level of knowledge and in-depth study of topics, the ability of critical evaluation, as well as the level of exposure and the ability to communicate.

## Obiettivi per lo sviluppo sostenibile

Codice	Descrizione
--------	-------------