

	<i>italiano</i>	<i>inglese</i>
DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO	Chimica farmaceutica generale	General Medicinal Chemistry
Modulo (se pertinente)	---	---
Lingua Insegnamento	Italiano	Italian
Obiettivi formativi	L'insegnamento si propone di fornire allo studente gli strumenti fondamentali per comprendere, dal punto di vista chimico-farmaceutico, i meccanismi d'azione a livello molecolare di un farmaco e le interazioni di legame farmaco-target. Il corso mira, inoltre, a far acquisire conoscenze relative ai processi farmacocinetici e all'influenza delle proprietà chimico-fisiche sui processi ADMET. L'insegnamento fornisce i principi di base per comprendere il processo di drug design per lo sviluppo di nuovi farmaci. Conoscenza e capacità di comprensione Al termine dell'insegnamento lo studente dovrà: • comprendere le interazioni tra farmaco e target biologico; • conoscere il processo di drug design e le strategie di ottimizzazione molecolare; • comprendere il ruolo delle proprietà chimico-fisiche nei processi farmacocinetici. Capacità di applicare conoscenza e comprensione Al termine dell'insegnamento lo studente sarà in grado di: • individuare le principali interazioni di un farmaco con il suo bersaglio molecolare; • progettare modifiche strutturali finalizzate alla modulazione delle proprietà farmacocinetiche e farmacodinamiche di molecole bioattive; • applicare approcci di base di drug design nello studio e nell'ottimizzazione dei farmaci.	The course aims to provide the fundamental principles to understand molecular mechanisms of action and drug-target interactions through a medicinal chemistry perspective. The course also aims to provide knowledge of pharmacokinetic processes and the influence of chemical and physical properties on ADMET processes. The course also provides tools necessary to understand the drug design process for the development of new drugs. Knowledge and Understanding processes By the end of this course, the students will be able: • to understand the interactions between each drug and corresponding biological target; • to understand the drug discovery process as well as molecular optimization strategies; • to understand the role of chemical and physical properties in pharmacokinetic processes. Ability to Apply Knowledge and Understanding processes By the end of this course, the students will be able: • to identify the main interactions of each drug with its molecular target; • to design structural modifications aimed at modulating the pharmacokinetic and pharmacodynamic properties of studied bioactive molecules; • to apply basic drug design approaches to drug discovery process and hit optimization.
Metodi Didattici	Lezioni frontali. Esercitazioni in aula ed esperienza di "flipped classroom". Strumenti a supporto della didattica PC e videoproiezione. Frequenza obbligatoria (50% percentuale minima di frequenza) per accedere all'esame finale come disciplinato dal Regolamento didattico del CdS. Le modalità di accertamento della frequenza prevedono l'uso di specifico applicativo UNIME.	Frontal lessons (lectures and seminars). Class discussion that follows a pre-determined set of questions and "flipped classroom" activities. Didactic equipment: video wall. Attendance mandatory (50% threshold) to qualify for final exam. The method of verifying attendance requires the use of a specific UNIME web application.

Prerequisiti	Conoscenze di Chimica generale e Chimica organica Biochimica generale ed applicata. Propedeuticità: esame di Biochimica generale ed applicata	Knowledge of general and organic chemistry and general and Applied Biochemistry. Propaedeutic exam: General and Applied Biochemistry
Verifiche dell'apprendimento	L'esame unico finale, in forma orale, tenderà ad accertare le conoscenze e le competenze acquisite attraverso la trattazione di tre argomenti. Elementi di valutazione: grado di competenze acquisite e capacità di comunicare efficacemente in modo chiaro, scientificamente corretto ed appropriato. La votazione è espressa in trentesimi.	The final oral exam will assess the knowledge and skills acquired through the discussion of three key topics. The following evaluation criteria will be applied: level of speaking skills gained by the study in terms of ability to clearly communicate, following a scientific and appropriate manner. Grades are expressed out of thirty.
Programma del corso (Contenuti)	Obiettivi, sviluppo storico della "Chimica Farmaceutica". Nomenclatura e classificazione dei farmaci (nome comune, nome chimico, classificazione ATC). Il ruolo della Farmacocinetica e Farmacodinamica nei processi di drug discovery. Introduzione alle Metodologie innovative per processi ecosostenibili di Drug Discovery. Aspetti chimico-farmaceutici della fase Farmacodinamica. Interazioni chimiche nel legame farmaco-target biologico e ruolo dei gruppi funzionali sull'attività biologica. Target biologici di natura proteica e non proteica. Teorie recettoriali. Farmaci multitarget ed interazione "bitopic". Interazioni proteina-proteina nello sviluppo di agenti terapeutici. Peptidi e peptidomimetici. Farmaci biotecnologici: proteine terapeutiche e farmaci legati ad anticorpi. Inibitori e attivatori enzimatici e promotori di degradazione enzimatica. Inibizione enzimatica con meccanismo suicida. Farmaci che interferiscono con le interazioni proteina-proteina. Progettazione di farmaci: individuazione di un lead compound; strategie e modificazioni molecolari per l'ottimizzazione del lead: isosteria classica e bioisosteria, complicazione e semplificazione molecolare, omologia, etc.. Influenza della stereochimica sull'attività farmacologica. Approcci computazionali nella predizione della fase farmacodinamica di nuovi farmaci: Ligand-based e structure-based drug-design. Principi di interazione ligando- proteina: Docking e Dinamica molecolare. SAR, QSAR e 3D-QSAR. Librerie chimiche, Virtual screening e riposizionamento dei farmaci. L'utilizzo dell'Intelligenza Artificiale (IA) nella progettazione di nuovi farmaci Aspetti chimico-farmaceutici della fase Farmacocinetica: biodisponibilità e assorbimento; Legge di Fick; funzione del pH. Reazioni di funzionalizzazione e Reazioni di coniugazione nel Metabolismo dei farmaci (fase I e fase II). Structural-alerts e tossicità. Strategie per migliorare la biodisponibilità. Profarmaci: bioprecursori e carrier-linked prodrugs. Soft-drugs e hard-drugs. Strategie computazionali e utilizzo dell'IA per la predizione della druglikeness.	Objectives and historical development of Medicinal Chemistry. Nomenclature and ATC classification of drugs. Pharmacokinetic and Pharmacodynamic relationships in drug discovery programs. Sustainable Drug Discovery strategies to create more eco-friendly and efficient drug production processes Chemical relationships of Pharmacodynamic (PD) phase: Chemical interactions affecting drug/biological targets. Functional groups regulating affinity/selectivity of drugs. Competitive, noncompetitive, allosteric enzyme inhibitors. Receptor theories. Multitarget agents and bitopic interaction. Drug-enzyme interaction: inhibitors, activators and degraders. Protein-protein interactive drugs. Biotech-drugs. Receptor-drug interaction. Drug design: identification of a "lead compound"; strategies and molecular modifications for lead optimization: isosteric and bioisosteric replacement, molecular complication and simplification, homology, etc.. Influence of the stereochemistry on pharmacological activity. Computer-assisted drug design in development of new therapeutics. 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. Chemical libraries, Virtual screening and Drug Repurposing. Artificial Intelligence (AI) in Drug Discovery process. Chemical relationships of Pharmacokinetic (PK) Phase: concept of bioavailability; drug absorption; Ficks law; 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. Design of bioprecursors and prodrugs; soft-drugs and hard-drugs. In silico prediction of PK properties and AI-assisted prediction of drug-likeness.

Testi di Riferimento	-G. Costantino, G. Sbardella, Chimica Farmaceutica. Edizione I/2024 EdiSES, Napoli, 2024 - A.Gasco, F. Gualtieri, C. Melchiorre. Chimica Farmaceutica. Casa Editrice Ambrosiana. ed 2020. - W. O. Foye. Foye's. Principi di chimica farmaceutica Piccin Nuova-Libraria, Padova, 2020 - Stevens. Chimica farmaceutica I processi di scoperta dei farmaci. Piccin. 2015	-G. Costantino, G. Sbardella, Chimica Farmaceutica. Edizione I/2024 EdiSES, Napoli, 2024 - A.Gasco, F. Gualtieri, C. Melchiorre. Chimica Farmaceutica. Casa Editrice Ambrosiana. ed 2020. - W. O. Foye. Foye's. Principi di chimica farmaceutica Piccin Nuova-Libraria, Padova, 2020 - Stevens. Chimica farmaceutica I processi di scoperta dei farmaci. Piccin. 2015
Altro	SDG 3 – Salute e benessere SDG 12 – Consumo e produzione responsabili	SDG 3 – Good health and well-being SDG 12 – Responsible consumption and production