

Informacje podstawowe

Nazwa przedmiotu	Projektowanie leków
Prowadzący	Dr Paweł Dąbrowski-Tumański
Wydział	Biologii i Nauk o Środowisku
Kierunek	Biotechnologia
Poziom studiów	II stopień
Profil studiów	ogólnoakademickim
Forma studiów	stacjonarne
Moduł specjalnościowy/ścieżka (jeśli dotyczy)	-
Dyscyplina naukowa, do której odnoszą się efekty uczenia się	nauki chemiczne
Przedmiot obowiązuje od roku akademickiego	2026/2027
Rok studiów	I
Semestr	I
Język wykładowy	polski
Status przedmiotu (obowiązkowy, obowiązkowy z grupy do wyboru)	do wyboru
Odniesienie do kierunkowych efektów uczenia się (symbole)	Wykład: BIO2_W04, BIO_W10 Ćwiczenia: BIO2_U04
Rodzaj zajęć	Wykład Ćwiczenia
Liczba godzin	Wykład: 30h Ćwiczenia: 30h
Liczba ECTS	Wykład: 2 Ćwiczenia: 2
Wymagania wstępne	• podstawy biochemii i biologii molekularnej • podstawy chemii organicznej
Opis i cele przedmiotu	Celem przedmiotu jest przedstawienie procesu odkrywania i rozwoju leków jako zintegrowanego cyklu decyzyjnego obejmującego identyfikację celu biologicznego, odkrywanie związków aktywnych, ich optymalizację oraz przejście do badań przedklinicznych i klinicznych. Szczególny nacisk położony jest na: • rozumienie procesu R&D leków, a nie tylko ich mechanizmów działania, • wykorzystanie narzędzi in silico w projektowaniu cząsteczek i terapii, • nowoczesne podejścia terapeutyczne (biologiczne, genowe, komórkowe),

	• interpretację danych i podejmowanie decyzji projektowych, • rolę badań klinicznych jako końcowego etapu rozwoju leku.
--	--

Treści programowe – wykład

	Temat/blok zajęć:	Liczba godzin
1.	Wprowadzenie do procesu odkrywania leków	2
2.	Identyfikacja i walidacja targetu	2
3.	Druggability i ocena celu terapeutycznego	2
4.	Źródła związków i drug repurposing	2
5.	Screening i wirtualne poszukiwanie hitów	2
6.	Farmakofory i podobieństwo chemiczne	2
7.	Projektowanie strukturalne leków	2
8.	SAR i optymalizacja leadów	2
9.	QSAR i modele predykcyjne	2
10.	Wieloparametrowa optymalizacja (MPO)	2
11.	Metody QM w projektowaniu leków	2
12.	Leki biologiczne	2
13.	Terapie komórkowe (CAR-T)	2
14.	Terapie genowe i RNA	2
15.	Od projektu do pacjenta: badania kliniczne	2
	Łącznie godzin:	30

Treści programowe – ćwiczenia

	Temat/blok zajęć:	Liczba godzin
1.	Pipeline odkrywania leku	2
2.	Przegląd struktur białek i kieszeni wiążących	2
3.	Wybór i analiza targetu terapeutycznego	2
4.	Wyszukiwanie ligandów w bazach danych	2
5.	Wirtualny screening	2
6.	Docking molekularny	2
7.	Analiza dynamiki kompleksu (MD – interpretacja)	2
8.	Analiza SAR	2
9.	Model QSAR	2
10.	Optymalizacja wieloparametrowa	2
11.	Stabilność i reaktywność liganda – interpretacja wyników QM	2
12.	Analiza przypadku: leki biologiczne	2
13.	Analiza przypadku: CAR-T lub terapia genowa	2
14.	Projekt szczepionki mRNA	2
15.	Projekt końcowy: pipeline odkrywania leku	2

	Łącznie godzin:	30
--	-----------------	----

Opis przedmiotowych efektów uczenia się i sposoby ich weryfikacji

Symbol efektu	Kierunkowe efekty uczenia się (zgodne z programem na BIPUKSW) Absolwent... (zna i rozumie/potrafi/jest gotów)	Opis przedmiotowych efektów uczenia się Student... (wyłącznie czasownikami operacyjnymi - czynności, które da się zweryfikować, mierzalne; w nawiasie należy podać numery tematów zajęć, które realizują dany efekt) Student...	Sposoby weryfikacji efektów uczenia się (np.: kolokwium pisemne, egzamin ustny, egzamin pisemny, sprawozdanie, prezentacja na zajęciach, raport, projekt indywidualny, grupowy.)
BIO2_W04	metody bioinformatyczne i cheminformatyczne oraz zasady przetwarzania i analizy danych biologicznych i chemicznych, w tym ich znaczenie dla interpretacji wyników badań	PEU_W1: Student wyjaśnia zasady działania modeli QSAR, analizy SAR oraz metod kwantowo-mechanicznych (QM) w kontekście optymalizacji właściwości fizykochemicznych i aktywności biologicznej leków (W8, W9, W11, Ć8, Ć9, Ć11).	Kolokwium pisemne
BIO2_U04	wykorzystywać specjalistyczne narzędzia bioinformatyczne i cheminformatyczne do analizy danych, modelowania procesów oraz rozwiązywania problemów badawczych	PEU_U1: Student potrafi przeprowadzić pełną procedurę wirtualnego screeningu oraz dokowania molekularnego w celu wyłonienia potencjalnych cząsteczek aktywnych (hitów) wobec zdefiniowanego celu terapeutycznego (W5, W7, Ć5, Ć6, Ć15)	Raport
BIO2_W10	podstawowe zasady tworzenia i rozwoju różnych form przedsiębiorczości	opisuje i wyjaśnia podstawowe zasady rozwoju i komercjalizacji produktu leczniczego, charakteryzuje etapy procesu R&D od identyfikacji celu terapeutycznego i wyboru cząsteczki aktywnej do badań przedklinicznych i klinicznych oraz wskazuje znaczenie decyzji projektowych, oceny potencjału rozwojowego i możliwości wdrożenia opracowanego rozwiązania w sektorze biotechnologicznym i farmaceutycznym	kolokwium pisemne

Metody dydaktyczne

(dostosowane do przedmiotowych efektów uczenia się)

wykład informacyjno-problemowy prowadzony z wykorzystaniem prezentacji multimedialnych; przedstawienie procesu odkrywania i rozwoju leków od identyfikacji i walidacji celu terapeutycznego do badań klinicznych; analiza strategii poszukiwania i optymalizacji związków aktywnych; omawianie metod SAR, QSAR, modelowania molekularnego i metod kwantowo-mechanicznych; analiza przypadków (case studies) dotyczących rozwoju leków małowcząsteczkowych, biologicznych, terapii komórkowych, genowych i RNA; analiza procesu R&D produktu leczniczego z uwzględnieniem podejmowania decyzji projektowych, potencjału rozwojowego i możliwości komercjalizacji; interpretacja danych pochodzących z poszczególnych etapów rozwoju leku; dyskusja dydaktyczna; pomoce dydaktyczne: prezentacje multimedialne, struktury molekularne, wyniki modelowania, bazy danych oraz przykłady rzeczywistych procesów rozwoju produktów leczniczych.

ćwiczenia komputerowe o charakterze praktycznym, problemowym i projektowym; praca ze specjalistycznymi narzędziami bioinformatycznymi i cheminformatycznymi; analiza struktur białek i kieszeni wiążących; wyszukiwanie ligandów w bazach danych; wirtualny screening i dokowanie molekularne; interpretacja wyników dynamiki molekularnej; wykonywanie analiz SAR i QSAR; optymalizacja wieloparametrowa kandydatów na leki; interpretacja wyników obliczeń QM; analiza przypadków dotyczących leków biologicznych, terapii CAR-T, terapii genowych i szczepionek mRNA; praca indywidualna i zespołowa; przygotowanie projektu końcowego obejmującego pipeline odkrywania leku; analiza możliwości dalszego rozwoju i wdrożenia opracowanego rozwiązania; przygotowywanie raportów i prezentacja wyników.

Opis nakładu pracy studenta w ECTS – wykład

Kontakt z prowadzącym	Aktywność	Liczba godzin	Razem liczba godzin / ECTS
bezpośredni	udział w zajęciach	30	30/1,2
	udział w zaliczeniach poza zajęciami	0	
praca własna	przygotowanie do zajęć	10	20/0,8
	przygotowanie do zaliczenia	10	

Opis nakładu pracy studenta w ECTS – ćwiczenia

Kontakt z prowadzącym	Aktywność	Liczba godzin	Razem liczba godzin / ECTS
bezpośredni	udział w zajęciach	30	30/1,2
	udział w zaliczeniach poza zajęciami	0	
praca własna	przygotowanie do zajęć	10	20/0,8
	przygotowanie do zaliczenia	10	

Kryteria oceny końcowej

(Opis składowych oceny końcowej zajęć, rozkład procentowy lub punktowy, informacja o dopuszczalnej liczbie nieobecności, inne kryteria)

- projekt końcowy: **40%**
- sprawozdania z ćwiczeń: **30%**
- kolokwia / testy: **30%**

Efekty uczenia się w zakresie wiedzy:

3,0 – Student posiada podstawową wiedzę dotyczącą procesu odkrywania i rozwoju leków. Wyjaśnia podstawowe zasady analiz SAR i QSAR oraz wskazuje zastosowanie metod modelowania molekularnego w projektowaniu leków. Rozpoznaje kolejne etapy procesu R&D produktu leczniczego, od identyfikacji celu terapeutycznego do badań klinicznych, oraz w podstawowym zakresie rozumie znaczenie rozwoju i możliwości wdrożenia produktu w sektorze biotechnologicznym i farmaceutycznym.

4,0 – Student posiada dobrą i uporządkowaną wiedzę dotyczącą procesu projektowania i rozwoju leków. Poprawnie wyjaśnia zasady SAR, QSAR, metod QM, screeningu i optymalizacji kandydatów na leki. Charakteryzuje kolejne etapy procesu R&D, analizuje znaczenie podejmowanych decyzji projektowych oraz potrafi powiązać parametry naukowe i technologiczne projektu z możliwością jego dalszego rozwoju i komercjalizacji.

5,0 – Student wykazuje się bardzo dobrą i pogłębioną wiedzą dotyczącą zintegrowanego procesu odkrywania, optymalizacji i rozwoju leków. Swobodnie analizuje i porównuje metody SAR, QSAR, modelowania strukturalnego i QM oraz ocenia ich znaczenie w podejmowaniu decyzji projektowych. Analizuje cały proces R&D od wyboru targetu do badań klinicznych, krytycznie ocenia potencjał rozwojowy projektu oraz potrafi uzasadnić decyzje dotyczące dalszego rozwoju i możliwości wdrożenia produktu leczniczego.

Efekty uczenia się w zakresie umiejętności:

3,0 – Student przy częściowym wsparciu prowadzącego wykorzystuje podstawowe narzędzia bioinformatyczne i cheminformatyczne do analizy celu terapeutycznego i potencjalnych ligandów. Wykonuje podstawowy wirtualny screening i dokowanie molekularne zgodnie z instrukcją oraz interpretuje najważniejsze wyniki.

4,0 – Student samodzielnie wykorzystuje specjalistyczne narzędzia bioinformatyczne i cheminformatyczne, przeprowadza wirtualny screening i dokowanie molekularne, analizuje struktury białek i ligandów oraz interpretuje wyniki analiz SAR, QSAR i modelowania molekularnego. Potrafi wyłonić potencjalne związki aktywne i uzasadnić ich wybór.

5,0 – Student samodzielnie projektuje i przeprowadza wieloetapową analizę in silico, właściwie dobiera narzędzia i parametry analizy, integruje wyniki screeningu, dockingu, SAR, QSAR, MD i analiz QM oraz krytycznie ocenia ich ograniczenia. Na podstawie uzyskanych danych proponuje i uzasadnia wybór kandydatów do dalszego rozwoju oraz przygotowuje spójny pipeline odkrywania leku.

Efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych:

3,0 – Student rozumie potrzebę krytycznej oceny danych i informacji wykorzystywanych w projektowaniu leków. Dostrzega podstawowe ograniczenia metod bioinformatycznych i cheminformatycznych oraz przy wsparciu prowadzącego potrafi uzasadnić decyzje podejmowane w trakcie realizacji projektu.

4,0 – Student samodzielnie i krytycznie ocenia dane oraz wyniki analiz wykorzystywanych w procesie projektowania leków. Dostrzega ograniczenia stosowanych metod, korzysta z

wiarygodnych źródeł naukowych oraz potrafi merytorycznie uzasadnić podejmowane decyzje dotyczące wyboru i optymalizacji kandydatów na leki.

5,0 – Student świadomie i krytycznie ocenia wiarygodność danych, metod i wyników wykorzystywanych w procesie odkrywania i rozwoju leków. Identyfikuje ograniczenia stosowanych narzędzi, porównuje alternatywne rozwiązania i uzasadnia podejmowane decyzje na podstawie aktualnej wiedzy naukowej. Dostrzega potrzebę ciągłego aktualizowania wiedzy oraz konsultowania złożonych problemów ze specjalistami z różnych obszarów procesu R&D.

Ocena połówkowa 3,5 jest wystawiana w przypadku pełnego osiągnięcia efektów uczenia się wymaganych na ocenę 3,0, ale niepełnego osiągnięcia efektów wymaganych na ocenę 4,0. Ocena połówkowa 4,5 jest wystawiana w przypadku pełnego osiągnięcia efektów uczenia się wymaganych na ocenę 4,0, ale niepełnego osiągnięcia efektów wymaganych na ocenę 5,0.

Literatura obowiązkowa

1.	Patrick G.L. – <i>An Introduction to Medicinal Chemistry</i> (fragmenty koncepcyjne)
2.	Leach A.R. – <i>Molecular Modelling: Principles and Applications</i>

Literatura uzupełniająca

1.	Publikacje: <i>Nature Reviews Drug Discovery</i> , <i>J. Med. Chem.</i>
2.	Materiały narzędziowe (AutoDock, RDKit, SwissTargetPrediction – dokumentacje)