

CORSO DI STUDIO: *Farmacia*

ANNO ACCADEMICO: 2025-2026

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO: *Progettazione razionale di farmaci innovativi*
(Materia opzionale a scelta)

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	III anno
Periodo di erogazione	II semestre (17/03/2026 – 09/06/2026)
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	8
SSD	Chimica Farmaceutica – CHEM-07/A
Lingua di erogazione	Italiano
Modalità di frequenza	Obbligatoria

Docente	
Nome e cognome	Stefano Alcaro (Codocenza CFU 2) Roberta Rocca (Codocenza CFU 3) Isabella Romeo (Codocenza CFU 3)
Indirizzo mail	alcaro@unicz.it rocca@unicz.it isabella.romeo@unicz.it
Telefono	0961-3694197 o 4198
Sede	Edificio Corpo H, 5° livello – Laboratorio di Chimica Farmaceutica
Sede virtuale	Su richiesta degli studenti tramite piattaforma google meet
Ricevimento	Da lunedì a venerdì (previo appuntamento email)

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
200	64		136
CFU/ETCS			
8	8		

Obiettivi formativi	Il corso di Progettazione razionale di farmaci innovativi fornisce una preparazione di base sulle tecniche “in silico” applicate alla progettazione razionale del farmaco, approfondendo i metodi computazionali disponibili, le loro basi teoriche, le proprietà calcolabili e il livello di accuratezza ottenibile. Gli studenti impareranno a selezionare i metodi più adatti in base al sistema studiato, a utilizzare software specifici e ad analizzare casi studio, sviluppando capacità critiche, autonomia nell'apprendimento e abilità comunicative nella presentazione dei risultati.
Prerequisiti	Per affrontare i contenuti del corso di Progettazione razionale di farmaci innovativi, lo studente deve conoscere i concetti base degli esami di Chimica Generale ed Inorganica, di Chimica Organica e di Chimica Farmaceutica Generale.



Metodi didattici	L'insegnamento sarà erogato tramite lezioni frontali, con il supporto di diapositive scaricabili dalla piattaforma e-learning dell'Ateneo. Su tale piattaforma si implementa anche il modulo didattico innovativo denominato MedChemBlog, allo scopo di acquisire conoscenze strutturali riguardo le principali interazioni farmaco-recettore. Gli studenti utilizzeranno software didattici da installare sui loro personal pc o disponibili in aula informatica. Saranno previsti seminari di approfondimento su tematiche specifiche per consentire agli studenti di comprendere maggiormente gli argomenti trattati e di sviluppare pensiero critico.
-------------------------	---

Risultati di apprendimento previsti Da indicare per ciascun Descrittore di Dublino (DD= DD1 Conoscenza e capacità di comprensione DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate DD3-5 Competenze trasversali	Descrittore di Dublino 1: conoscenza e capacità di comprensione. Al termine del corso, lo/la studente/studentessa dovrà conoscere: • i principi teorici alla base delle principali tecniche "in silico" applicate alla progettazione razionale di farmaci; • i metodi computazionali disponibili per lo studio di sistemi molecolari, comprendendone le fondamenta teoriche e il campo di applicabilità; • le proprietà molecolari fondamentali per la progettazione razionale di farmaci; • I diversi metodi computazionali da applicare in base alla natura del sistema studiato e alla proprietà di interesse; • I principali software per condurre studi "in silico" comprendendone potenzialità, limiti e difficoltà pratiche. Descrittore di Dublino 2: capacità di applicare conoscenza e comprensione. Al termine del corso, lo/la studente/studentessa sarà in grado di: • Descrivere i principi teorici alla base delle principali tecniche "in silico" applicate alla progettazione razionale di farmaci; • Identificare i metodi computazionali disponibili per lo studio di sistemi molecolari, comprendendone le fondamenta teoriche e il campo di applicabilità; • Valutare quali proprietà molecolari possano essere calcolate con ciascun metodo e con quale livello di accuratezza; • Scegliere il metodo computazionale più appropriato in base alla natura del sistema studiato e alla proprietà di interesse; • Utilizzare software specifici condurre studi "in silico" conoscendone potenzialità, limiti e difficoltà pratiche. Descrittore di Dublino 3: capacità critiche e di giudizio ritenuti utili a determinare giudizi autonomi, inclusa la riflessione su temi sociali, scientifici o etici ad essi connessi. • Autonomia di giudizio Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di: • formulare giudizi informati nella scelta della metodologia più adatta per specifici problemi di progettazione razionale del farmaco, tenendo conto del livello di accuratezza richiesto e delle risorse computazionali disponibili;
---	---



	• <i>analizzare casi studio rappresentativi per comprendere come lo studio “in silico” abbia contribuito a successi nel campo della progettazione dei farmaci.</i> Descrittore di Dublino 4: <i>capacità di comunicare quanto si è appreso; gli studenti devono saper comunicare informazioni, idee, problemi e soluzioni a interlocutori specialisti e non specialisti.</i> • Abilità comunicative <i>Al termine dell’insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di:</i> • <i>comunicare, in modo chiaro e coerente, i principi teorici e le applicazioni di metodi in silico per la progettazione razionale di farmaci innovativi, anche a interlocutori non specialisti;</i> • <i>presentare e discutere i risultati ottenuti da simulazioni e calcoli, illustrando criticamente vantaggi, limiti e implicazioni delle scelte metodologiche effettuate.</i> Descrittore di Dublino 5: <i>capacità di proseguire lo studio in modo autonomo nel corso della vita. Lo/La studente/studentessa deve aver sviluppato delle capacità di apprendimento necessarie per intraprendere studi successivi con un alto grado di autonomia.</i> • Capacità di apprendere in modo autonomo <i>Al termine dell’insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di</i> • <i>Approfondire autonomamente le conoscenze acquisite durante il corso attraverso la consultazione della letteratura scientifica, sviluppando capacità di aggiornamento continuo nel campo della progettazione razionale;</i> • <i>Saper utilizzare banche dati online che permettano di essere sempre aggiornati sui possibili target di interesse terapeutico;</i> • <i>Organizzare il proprio percorso di studio e approfondimento, dimostrando capacità di autovalutazione e consapevolezza delle nozioni ricevute e acquisite per la consolidazione di una bagaglio culturale forte e dinamico;</i>
--	--

Contenuti di insegnamento (Programma)	• <i>Progettazione razionale del farmaco ed introduzione ai metodi computazionali.</i> • <i>Intelligenza Artificiale applicata alla progettazione di farmaci innovativi.</i> • <i>Rappresentazione molecolare, notazioni standard e loro interconversione in formati differenti.</i> • <i>Strumenti di manipolazione grafica e visualizzazione di modelli tridimensionali.</i> • <i>Analisi conformazionale: metodi per l’ottimizzazione della geometria e la minimizzazione dell’energia. Metodi quantomeccanici e meccanica molecolare.</i> • <i>Banche dati strutturali: Protein Data Bank (PDB), Crystallography Open Database (COD).</i> • <i>Metodi Structure-Based: analisi del sito di binding, docking, funzioni di scoring e screening virtuale.</i>
---	--



	• Applicazione delle tecniche di docking alla predizione di interazioni farmaco-target. • Metodi MIF (Molecular Interaction Fields). • Approcci Ligand-Based: QSAR, Modelli farmacoforici. • Chemoinformatica e sviluppo del farmaco. • Database (Banche dati) chimici e di farmaci. • Calcoli e "filtering" (selezione) delle proprietà delle molecole. • Similarità molecolari. • Predizioni ADME (Assorbimento - distribuzione - metabolismo ed escrezione) e di tossicità di molecole bioattive. • Bioinformatica strutturale nello sviluppo del Farmaco (Modelli di omologia). • Dinamica Molecolare.
Testi di riferimento	J. B. Taylor, D. J. Triggle <i>Comprehensive Medicinal Chemistry II - Volume 4 : Computer-Assisted Drug Design</i> , Elsevier, ISBN: 0-08-044513-6
Note ai testi di riferimento	Ulteriori letture consigliate per approfondimento: G. Costantino, G. Sbardella, <i>Chimica Farmaceutica – I edizione</i> , EdiSES Edizioni S.r.l. Napoli, 2024. ISBN: 9788836231522 Diapositive delle lezioni, e modulo didattico innovativo MedChemBlog saranno resi disponibili dal docente.
Materiali didattici	Tutto il materiale didattico sarà disponibile sulla piattaforma e-learning dell'Università Magna Græcia di Catanzaro, all'indirizzo: https://elearning.unicz.it/ , nella pagina dedicata al corso di Progettazione razionale di farmaci innovativi del CdL in Farmacia.

Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	L'accertamento dell'apprendimento avverrà attraverso una prova finale e attività intermedie che permetteranno di valutare sia le conoscenze teoriche acquisite sia le competenze pratiche sviluppate. La prova finale potrà includere: Prova scritta: • tipologia: quesiti a risposta aperta. • durata: 60 minuti. • Obiettivo: verificare la comprensione dei concetti teorici e dei metodi computazionali trattati. • Materiale consentito durante la prova: Non è consentito l'utilizzo di testi, manuali, appunti, dizionari glossari, tavole o altro materiale didattico durante la prova scritta. Eventuali materiali aggiuntivi (come strumenti compensativi) saranno consentiti esclusivamente agli studenti che ne abbiano diritto, previa presentazione di certificazione (es. DSA), in accordo con la normativa vigente e con il regolamento didattico d'Ateneo. Prova orale: • Tipologia: project work individuale o di gruppo con presentazione finale, mirato a simulare un processo completo di



	<i>progettazione computazionale di un farmaco, dalla scelta del target all'analisi dei ligandi</i> • <i>Durata indicativa: circa 20-30 minuti.</i> <i>Gli studenti svolgeranno mini-progetti individuali con domande di riflessione finale e svolgere esercizi pratici guidati con soluzioni commentate, per confrontare le proprie risposte con quelle attese e identificare gli errori più comuni, come ulteriore strumento di preparazione e auto-valutazione.</i> <i>Nota: Non sono previste modalità di verifica differenziate per studenti frequentanti e non frequentanti.</i>
<i>Criteri di valutazione</i>	Conoscenza e capacità di comprensione: <i>Gli/Le studenti/studentesse dovranno dimostrare di conoscere in modo approfondito gli argomenti trattati durante il corso, evidenziando:</i> • <i>Completezza nella conoscenza delle basi teoriche dei metodi computazionali applicati alla progettazione del farmaco.</i> Conoscenza e capacità di comprensione applicate: <i>Gli/Le studenti/studentesse dovranno dimostrare di saper applicare le conoscenze apprese durante il corso, dimostrando:</i> • <i>Capacità di utilizzare correttamente software specifici per lo studio di sistemi molecolari e di interpretare i risultati ottenuti in modo critico e consapevole.</i> Autonomia di giudizio: <i>Gli/Le studenti/studentesse dovranno mostrare autonomia e capacità critica nella valutazione delle informazioni acquisite, evidenziando:</i> • <i>Abilità nel selezionare e motivare la scelta del metodo computazionale più adeguato in funzione della proprietà da studiare e del tipo di sistema molecolare, riconoscendone potenzialità e limiti</i> Abilità comunicative: <i>Gli/Le studenti/studentesse dovranno dimostrare efficaci capacità comunicative attraverso:</i> • <i>un'esposizione chiara, coerente e ben strutturata degli argomenti.</i> • <i>capacità di utilizzare correttamente e con competenza il linguaggio tecnico-scientifico proprio della disciplina.</i> • <i>abilità nell'interagire con il docente, mostrando chiarezza e precisione nelle risposte.</i> Capacità di apprendere: <i>Gli/Le studenti/studentesse dovranno dimostrare di aver sviluppato competenze che consentano una prosecuzione degli studi critica e consolidata, ovvero:</i>



	• capacità di approfondimenti autonomi dei contenuti, dimostrata dalla possibilità di ampliare la discussione orale con collegamenti interdisciplinari; • utilizzo critico della letteratura scientifica e degli strumenti indicati dal docente.
<i>Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</i>	Il giudizio finale è attribuito in idoneo/non idoneo. La verifica dell'apprendimento avviene tramite due prove obbligatorie: 1. Prova scritta (durata: 60 minuti) 2. Prova orale (durata indicativa: 20-30 minuti): una volta superata la prova scritta, il colloquio sarà mirato a verificare il grado di apprendimento e la conoscenza della Progettazione razionale di farmaci innovativi, discutendo la simulazione di un processo completo di progettazione computazionale di un farmaco, dalla scelta del target all'analisi dei ligandi. Formulazione del giudizio finale: I criteri sulla base dei quali sarà giudicato/a lo/la studente/studentessa sono: • Non idoneo: conoscenze frammentarie o scorrette, incapacità di utilizzare i software, mancata giustificazione delle scelte metodologiche, analisi non pertinente, esposizione confusa o imprecisa, nessuna evidenza di studio autonomo o di approfondimento. • Idoneo: conoscenza solida e ben strutturata dei metodi e dei principi teorici, buon uso dei software in autonomia, scelte motivate con chiarezza, capacità di valutare limiti e potenzialità, esposizione chiara e coerente, ricerca di fonti e approfondimenti pertinenti.
Altro	

