

ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

(1) ΓΕΝΙΚΑ

ΣΧΟΛΗ	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
ΤΜΗΜΑ	ΔΔΜΠΣ «ΑΝΟΡΓΑΝΗ ΒΙΟΛΟΓΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ»		
ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ		
ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	3	ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ	1
ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ	Βιοφυσική της φαρμακευτικής δράσης		
ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ <i>σε περίπτωση που οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται σε διακριτά μέρη του μαθήματος π.χ. Διαλέξεις, Εργαστηριακές Ασκήσεις κ.λπ. Αν οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται ενιαία για το σύνολο του μαθήματος αναγράψτε τις εβδομαδιαίες ώρες διδασκαλίας και το σύνολο των πιστωτικών μονάδων</i>	ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ	ΠΙΣΤΩΤΙΚΕΣ ΜΟΝΑΔΕΣ	
		5	
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).</i>			
ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	Επιστημονικός τομέας, ειδικό υπόβαθρο, εξειδικευμένες γενικές γνώσεις		
ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:	ΟΧΙ		
ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:	ΕΛΛΗΝΙΚΗ/ΑΓΓΛΙΚΗ		
ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS	ΝΑΙ		
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)	http://bic.chem.uoi.gr/physical.html		

(2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Μαθησιακά Αποτελέσματα

Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες καταλλήλου επιπέδου που θα αποκτήσουν οι φοιτητές μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος.

Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α

- Περιγραφή του Επιπέδου των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για κάθε ένα κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο Προσόντων του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης
- Περιγραφικοί Δείκτες Επιπέδων 6, 7 & 8 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων Διά Βίου Μάθησης και το Παράρτημα Β
- Περιληπτικός Οδηγός συγγραφής Μαθησιακών Αποτελεσμάτων

Μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος, περιγραφικού δείκτη 6 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων, οι φοιτητές θα πρέπει να είναι σε θέση:

- Να γνωρίζουν βασικές αρχές της βιοφυσικής των βιομορίων και των φαρμάκων
- Να γνωρίζουν την επίδραση λειτουργικών ομάδων και στερεοχημείας στη βιολογική δράση ενώσεων
- Να γνωρίζουν βασικούς δικτυακούς τόπους εύρεσης πληροφορίας δομικής βιολογίας
- Να γνωρίζουν είδη λογισμικού και της αρχές της μοριακής προσομοίωσης
- Να γνωρίζουν βασικές έννοιες πολυπαραμετρικής στατιστικής ανάλυσης
- Να γνωρίζουν τις βασικές αρχές που διέπουν τις Ποσοτικές Σχέσεις Δομής Δράσης (QSAR)

Γνώσεις

- Αλληλεπιδράσεις πρωτεΐνης-προσδέτη (μοριακή πρόσδεση και μοριακή δυναμική)
- Θερμοδυναμική της αλληλεπίδρασης (ηλεκτρονιακές, στερεικές, τοπολογικές και υδροφοβικές παράμετροι)
- Μεθοδολογία QSAR

Δεξιότητες

- Εξοικείωση με τη μοριακή μοντελοποίηση
- Εξοικείωση με την ανάλυση βιο-φυσικοχημικών ιδιοτήτων μέσω πολυπαραμετρικών μεθόδων

Ικανότητες

- Ικανότητα για ομαδική ή αυτοτελή εργασία

Δυνατότητα εκμάθησης σχετικών υπολογιστικών πακέτων

Γενικές Ικανότητες

Λαμβάνοντας υπόψη τις γενικές ικανότητες που πρέπει να έχει αποκτήσει ο πτυχιούχος (όπως αυτές αναγράφονται στο Παράρτημα Διπλώματος και παρατίθενται ακολούθως) σε ποια / ποιες από αυτές αποσκοπεί το μάθημα:

Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών

Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις

Λήψη αποφάσεων

Αυτόνομη εργασία

Ομαδική εργασία

Εργασία σε διεθνές περιβάλλον

Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον

Σχεδιασμός και διαχείριση έργων

Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα

Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον

Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας και ευαισθησίας σε θέματα φύλου

Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και

επαγωγικής σκέψης

Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών

.....
Άλλες...

.....

Οι γενικές ικανότητες που θα πρέπει να έχει αποκτήσει ο φοιτητής/φοιτήτρια και στις οποίες αποσκοπεί το μάθημα είναι:

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών
- Αυτόνομη εργασία
- Δυνατότητα για ομαδική εργασία
- Δυνατότητα εκμάθησης σχετικών υπολογιστικών πακέτων
- Απόκτηση δεξιάτητας δημόσιας παρουσίασης βιβλιογραφικής έρευνας
- Απόκτηση του κατάλληλου θεωρητικού γνωστικού υπόβαθρου ώστε να είναι δυνατή η περαιτέρω εκπαίδευση του, σε διδακτορικό επίπεδο (θεωρητικό και εργαστηριακό) .

(3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

1. Σχεδιασμός φαρμάκων. Εισαγωγή: Συσχέτιση παραμέτρων (γεωμετρία, στερεοχημεία, βιοδιαθεσιμότητα, τοξικότητα, παρενέργειες, αλληλεπιδράσεις).
2. Η βιοφυσική της 3D δομής. Δομή πρωτεϊνών και μακρομορίων. Ευκαμψία, Αναδίπλωση – Ενεργειακά μονοπάτια.
3. Δομική Βιολογία. Πειραματικές τεχνικές (X-ray, NMR)
4. Βάσεις δεδομένων. Δομή βάσεων και σχετικών αρχείων (PDB)
5. Εισαγωγή στο μοριακό modeling. Τεχνικές μοντελοποίησης και αλγόριθμοι.
6. Ενώσεις συναρμογής. Θεωρητική μελέτη αντικαρκινικών ενώσεων συναρμογής και των μηχανισμών αντικαρκινικής δράσης τους.
7. Μοντέλο ισολοβικής αναλογίας. Προσχεδιασμός φαρμάκων
8. Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής βιομορίων. Αλληλεπιδράσεις πρωτεΐνης-προσδέτη (μοριακή πρόσδεση και μοριακή δυναμική) Θερμοδυναμική της αλληλεπίδρασης (ηλεκτρονιακές, στερικές, τοπολογικές και υδροφοβικές παράμετροι). Force fields.
9. Έννοιες πολυπαραμετρικής στατιστικής ανάλυσης
10. QSAR - Σχεδιασμός φαρμάκων. Εισαγωγή: Συσχέτιση παραμέτρων (γεωμετρία, στερεοχημεία, βιοδιαθεσιμότητα, τοξικότητα, παρενέργειες, αλληλεπιδράσεις).
11. Διαθέσιμο λογισμικό (επίδειξη ή/και hands-on training)
12. Εργασία - Παρουσίαση

(4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.	Πρόσωπο με πρόσωπο																								
ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές	E-mail, PowerPoint, Επίδειξη ειδικού λογισμικού																								
ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας. Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη & ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία, Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ. Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS	<table border="1"><thead><tr><th>Δραστηριότητα</th><th>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</th></tr></thead><tbody><tr><td>Διαλέξεις</td><td>39</td></tr><tr><td>Συγγραφή εργασίας</td><td>43</td></tr><tr><td>Ατομική μελέτη, προετοιμασία</td><td>43</td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td></td><td></td></tr><tr><td>Σύνολο Μαθήματος</td><td>125</td></tr></tbody></table>	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου	Διαλέξεις	39	Συγγραφή εργασίας	43	Ατομική μελέτη, προετοιμασία	43															Σύνολο Μαθήματος	125
	Δραστηριότητα	Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου																							
Διαλέξεις	39																								
Συγγραφή εργασίας	43																								
Ατομική μελέτη, προετοιμασία	43																								
Σύνολο Μαθήματος	125																								
ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.	Η αξιολόγηση των φοιτητών γίνεται είτε με παρουσίαση σε επιτροπή διδασκόντων και δημόσιο ακροατήριο ατομικών εργασιών (ποσοστό 50%) είτε με την τελική γραπτή εξέταση (ποσοστό 50%). Η τελευταία περιλαμβάνει: Ερωτήσεις πολλαπλής επιλογής, σύντομης απάντησης, κρίσης, ανάπτυξης καθώς και επίλυσης προβλημάτων																								

(5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

-Προτεινόμενη Βιβλιογραφία :

- Molecular Biophysics for the Life Sciences
Norma M. Allewell; Linda O. Narhi; Ivan Rayment
Springer, 9781461485476
- Computational Biochemistry and Biophysics
Oren M. Becker; Alexander D. Mackerell Jr; Benoit Roux; Masakatsu Watanabe
Marcel Dekker Ltd, 082470455X
- A Primer on QSAR/QSPR Modeling: Fundamental Concepts (Springer briefs in Molecular Science)
Kunal Roy; Supratik Kar; Rudra Narayan Das
Springer, 9783319172804
- Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR
Matthias Dehmer; Kurt Varmuza; Danail Bonchev; Frank Emmert-Streib
Wiley-Blackwell, 9783527324347

-Συναφή επιστημονικά περιοδικά:

- Journal of Chemical Information and Modeling
- Journal of Medicinal Chemistry
- RSC Advances
- Journal of Biological Physics
- Biophysical Journal
- Biophysical Chemistry