

DISCIPLINELE: CHIMIE FIZICĂ; BAZELE FIZICO-CHIMICE ALE PREFORMULĂRII MEDICAMENTULUI; PROIECTAREA MEDICAMENTULUI (OPȚIONAL); POLIMORFISMUL SUBSTANȚELOR MEDICAMENTOASE (OPȚIONAL).

POSTUL: PROFESOR UNIVERSITAR, POZIȚIA 22

1. Termodinamica clasică - Noțiuni de bază
2. Termodinamica clasică - Energia. Schimburi energetice în termodinamică – lucrul și căldura
3. Principiile termodinamicii
4. Echilibre fizice: echilibrul fazelor, regula fazelor
5. Diagrama de faze a apei
6. Echilibre fizice. Sisteme cu un component
7. Echilibre fizice. Sisteme cu două componente – echilibre de solubilitate
8. Echilibre fizice. Sisteme cu două componente – echilibrul de partiție
9. Echilibre fizice. Sisteme cu două componente – proprietăți coligative
10. Echilibre chimice
11. Legătura chimică. Polarizarea legăturii. Momentele dipolare
12. Geometria moleculelor. Stereoizomeria
13. Forțe intermoleculare
14. Proprietăți electrice și magnetice ale moleculelor
15. Radiația electromagnetică. Legea absorbției
16. Spectroscopia moleculară - spectre de rotație și de vibrație
17. Spectroscopia moleculară - spectre electronice
18. Spectroscopia moleculară - spectre RMN
19. Fenomene în stări excitate
20. Stări de agregare - generalități
21. Stări de agregare - starea lichidă
22. Stări de agregare - starea solidă
23. Electrochimie-noțiuni de bază
24. Electrochimie- Teoria disociației electrolitice
25. Electrochimie- Reacții acido – bazice în mediu apos. Forma ionică a substanțelor în sânge
26. Electrochimie- Reacții de oxido – reducere
27. Cinetica chimică – viteza de reacție. Cinetica formală
28. Cinetica chimică – Ordin de reacție. Dependența de temperatură a vitezei de reacție
29. Cinetica chimică – Teoria ciocnirilor. Teoria complexului activat. Cataliza
30. Sisteme disperse/ coloizi – definiție, clasificare, preparare
31. Sisteme disperse/ coloizi – proprietăți cinetice și mecanice
32. Sisteme disperse/coloizi – proprietăți optice și electrice
33. Sisteme disperse, coloizi - fenomene superficiale, adsorbția la interfețe
34. Paradigma centrală a QSAR
35. Cuantificarea numerică a activității biologice
36. Cuantificarea numerică a structurii moleculare
37. Stabilirea modelului QSAR prin analiză regresională
38. Structura biomacromoleculelor
39. Polimorfismul – Noțiuni de bază
40. Starea solidă și polimorfismul
41. Aspecte termodinamice privind formarea și stabilitatea polimorfilor
42. Metode de obținere a formelor polimorfe
43. Metode de caracterizare a formelor polimorfe și pseudomorfe

Bibliografie

1. Kurunczi, L., Curs de chimie fizică și coloidală pentru farmaciști, Editura Mirton, Timișoara, 2000
2. Simu, G., Kurunczi L., Chimie Physique- Notes de cours, Tome I, Editura Victor Babes, Timisoara, 2014.
3. Simu, G., Kurunczi L., Ledeti, I.V., Chimie Physique- Notes de cours, Tome II, Editura Victor Babes, Timisoara, 2014.
4. Arnaud, P., Chimie physique- cours, 4^{eme} édition, Dunod, Paris, 1998
5. Atkins, P. W., Tratat de Chimie Fizică, Editura tehnică, București, 1996
6. Atkins, P. W., Physical Chemistry, 8th Ed, Oxford Univ. Press, 2006 10. Ott, J.B., Boerio-Goates, J., Chemical Thermodynamics: Advanced Applications, Elsevier Science & Technology Books, 2000
7. Connors, K. A., Thermodynamics of Pharmaceutical Systems. An introduction for Students of Pharmacy., Wiley-Interscience, Hoboken, 2002
8. Ledeti I.V., Simu G.M., Chimie Fizica aplicata pentru farmacisti, Vol. I. , Ed. Mirton, Timisoara 2010
9. Simu G.M., Ledeti I.V. Chimie Fizica aplicata pentru farmacisti, Vol. II, Ed. Mirton, Timisoara 2011
10. Britain H.G (editor), Polymorphism in Pharmaceutical Solids, 2nd edition, Informa, 2009 (disponibilă la disciplină)
11. Rouessac F., Rouessac A. Chemical Analysis - Modern Instrumentation Methods and Techniques, 2nd edition, John Wiley & Sons, 2007.
12. Sweetman S.C. (editor), Martindale - The Complete Drug Reference, 36th edition, Pharmaceutical Press 2009
13. Kurunczi L., „Proiectarea medicamentelor asistată de computer. QSAR. Relații cantitative structură – activitate.” Ed. Eurobit, Timișoara, 1998
14. Chiriac A., Ciubotariu D., Simon Z., Editori, „Relații cantitative structură chimică – activitate biologică (QSAR). Metoda MTD.”, Editura Mirton, Timișoara, 1996
15. Hansch C., Leo A., „Exploring QSAR. Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology.” ACS Professional Reference Book, ACS, Washington, 1995
16. Leach A. R., Gillet V. J., „An Introduction to Chemoinformatics”, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003

PHYSICAL CHEMISTRY; PHYSICO-CHEMICAL BASES OF DRUG PREFORMULATION; DRUG DESIGN (OPTIONAL); POLYMORPHISM OF DRUGS TOPICS

1. Classical thermodynamics- Basic concepts
2. Classical thermodynamics- Energy. Energetic changes in thermodynamics- work and heat
3. The laws of thermodynamics
4. Physical equilibria: phases equilibrium, the phase rule
5. Phase diagram of water
6. Physical equilibria. One component systems
7. Physical equilibria. Two component systems – solubility
8. Physical equilibria. Two component systems – partition
9. Physical equilibria. Two component systems –colligative properties
10. Chemical equilibria
11. The chemical bond. Polarity of bond. Dipole moments
12. Molecular geometry. Stereoisomerism

13. Intermolecular interactions
14. Electrical and magnetic properties of molecules
15. Electromagnetic radiation. Absorption law
16. Molecular spectroscopy - rotational and vibrational spectra
17. Molecular spectroscopy - electronic spectra
18. Molecular spectroscopy - NMR Spectroscopy
19. Phenomena in electronically excited states
20. State of matter-basic concepts
21. State of matter- liquid state
22. State of matter- solid state
23. Electrochemistry- Basic concepts
24. Electrochemistry- Electrolytic dissociation theory
25. Electrochemistry- Acid- base reactions in aqueous solutions. Ionic form of drugs in blood
26. Electrochemistry- Redox reactions
27. Chemical kinetics- Rate of chemical reactions. Formal kinetics
28. Chemical kinetics- Reaction order. The dependence of reaction rate vs. temperature
29. Chemical kinetics- Kinetic theories. Catalysis
30. Dispersions/ colloids – definition, classification, preparation
31. Dispersions/ colloids – kinetic and mechanic properties
32. Dispersions/ colloids – optical and electrical properties
33. Dispersions/ colloids- interfacial phenomena, adsorption
34. Central paradigm of QSAR
35. Numerical quantification of biological activity
36. Numerical quantification of the molecular structure
37. Establishing the QSAR model through regression analysis
38. Structure of biomacromolecules
39. Polymorphism- Basic concepts
40. Solid state and polymorphism
41. Thermodynamic aspects of polymorph formation and stability
42. Methods for obtaining polymorphic forms
43. Methods for characterization of polymorphic and pseudomorphic forms

References

1. Kurunczi, L., Curs de chimie fizică și coloidală pentru farmaciști, Editura Mirton, Timișoara, 2000
2. Simu, G., Kurunczi L., Chimie Physique- Notes de cours, Tome I, Editura Victor Babes, Timisoara, 2014.
3. Simu, G., Kurunczi L., Ledeti, I.V., Chimie Physique- Notes de cours, Tome II, Editura Victor Babes, Timisoara, 2014.
4. Arnaud, P., Chimie physique- cours, 4^{eme} édition, Dunod, Paris, 1998
5. Atkins, P. W., Tratat de Chimie Fizică, Editura tehnică, București, 1996
6. Atkins, P. W., Physical Chemistry, 8th Ed, Oxford Univ. Press, 2006 10. Ott, J.B., Boerio-Goates, J., Chemical Thermodynamics: Advanced Applications, Elsevier Science & Technology Books, 2000
7. Connors, K. A., Thermodynamics of Pharmaceutical Systems. An introduction for Students of Pharmacy., Wiley-Interscience, Hoboken, 2002
8. Ledeti I.V., Simu G.M., Chimie Fizica aplicata pentru farmacisti, Vol. I. , Ed. Mirton, Timisoara 2010

9. Simu G.M., Ledeti I.V. Chimie Fizica aplicata pentru farmacisti, Vol. II, Ed. Mirton, Timisoara 2011
10. Britain H.G (editor), Polymorphism in Pharmaceutical Solids, 2nd edition, Informa, 2009 (disponibilă la disciplină)
11. Rouessac F., Rouessac A. Chemical Analysis - Modern Instrumentation Methods and Techniques, 2nd edition, John Wiley & Sons, 2007.
12. Sweetman S.C. (editor), Martindale - The Complete Drug Reference, 36th edition, Pharmaceutical Press 2009
13. Kurunczi L., „Proiectarea medicamentelor asistată de computer. QSAR. Relații cantitative structură – activitate.” Ed. Eurobit, Timișoara, 1998
14. Chiriac A., Ciubotariu D., Simon Z., Editori, „Relații cantitative structură chimică – activitate biologică (QSAR). Metoda MTD.”, Editura Mirton, Timișoara, 1996
15. Hansch C., Leo A., „Exploring QSAR. Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology.” ACS Professional Reference Book, ACS, Washington, 1995
16. Leach A. R., Gillet V. J., „An Introduction to Chemoinformatics”, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003