

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії



«    » 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**Історія створення лікарських засобів**  
(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань           10 Природничі науки  
спеціальність       **102 Хімія**  
освітній рівень      **магістр**  
освітня програма   **Високі технології (Хемоінформатика)**  
  
вид дисципліни     **вибіркова**

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>4</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>5</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>екзамен</u>

Викладач: д.х.н., проф. Комаров І.В

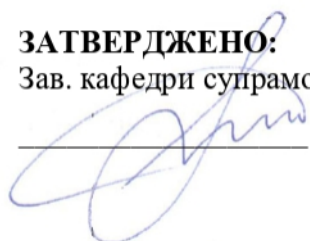
Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)

на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)

**Розробник:** д.х.н., проф. Комаров І.В.

**ЗАТВЕРДЖЕНО:**

Зав. кафедри супрамолекулярної хімії

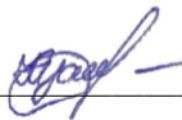
  
\_\_\_\_\_ (Рябухін С.В.)

**Протокол №7 від «19» серпня 2022 року**

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

**Протокол №1 від «9» вересня 2022 року**

Голова науково-методичної комісії \_\_\_\_\_



(Русінчук Н. М.)

## ВСТУП

### 1. Мета дисципліни :

Ознайомлення студентів з основними прийомами структурно-орієнтованого дизайну лікарських засобів.

### 2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

*Студент повинен знати:*

*фундаментальні основи загальної, неорганічної та органічної хімії, біохімії, молекулярної біології, фізичної хімії та супрамолекулярної хімії, а також основ фізичних методів дослідження.*

*Студент повинен вміти:*

*Користуватися сучасними електронними базами даних в галузі хімії і біології, іншими Інтернет-ресурсами.*

### 3. Анотація навчальної дисципліни

Даний курс бере за основу історичний ракурс розвитку медичної хімії. Починаючи з історичних прикладів, і закінчуючи найсучаснішими прикладами викладач показує логіку розвитку методів розробки і дизайну лікарських засобів, і проектує цю логіку в майбутнє. На практичних заняттях викладаються основи віртуального скринінгу, докінг, скорінг, молекулярна динаміка. Впродовж усього курсу під час самостійної роботи, практичних занять і лекцій студенти знайомляться з реальними прикладами дизайну лікарських засобів з актуальних літературних джерел.

### 4. Завдання (навчальні цілі)

Навчання дисципліни має на меті розвивати у студентів такі компетентності:

Загальні компетенції:

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

ЗК6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК 8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

ЗК11. Здатність діяти на основі етичних міркувань (мотивів).

ЗК12. Здатність працювати автономно.

ЗК13. Здатність до активного збереження довкілля.

ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

Фахові компетенції:

ФК1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.

ФК2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.

ФК3. Здатність організувати, планувати та реалізувати хімічний експеримент.

ФК4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

ФК5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

ФК7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).

ФК8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.

ФК9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

### 5. Результати навчання за дисципліною:

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.	<b>Знати:</b> 1.1. основні методи дослідження будови біомолекул 1.2. основні прийоми сучасного раціонального пошуку лікарських засобів, що базуються на знаннях про будову біологічних мішеней.	<i>Лекції</i>	<i>Контрольні роботи</i>	35%
2.	<b>Вміти:</b> 2.1. користуватися сучасними комп'ютерними програмами для докунгу та молекулярної динаміки, проводити віртуальний скринінг бібліотек хімічних сполук	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	30%
		<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	15%
3.	3.1. Вміти працювати в групі на семінарах та практичних роботах	<i>Практичні заняття</i>	<i>Звіти</i>	10%
4.	4.1. Вміти самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.	<i>Самостійна робота</i>	<i>Контрольна робота</i>	10%

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання**

<b>Результати навчання дисципліни</b>					
<b>Програмні результати навчання</b>	<b>1.1</b>	<b>1.2</b>	<b>2.1</b>	<b>3.1</b>	<b>4.1</b>
P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+	+
P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+		
P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	+	+	+	+	
P4. Синтезувати хімічні сполуки із заданими властивостями, аналізувати їх і оцінювати відповідність заданим вимогам.	+	+	+		
P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+	+		
P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.	+	+			
P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.	+			+	+
P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.		+	+		+
P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.		+	+		
P11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.		+	+		
P12. Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.		+	+		
P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.			+		
P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.			+	+	+
P15. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.	+	+	+		

## 7. Схема формування оцінки.

### 7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 – РН 1.– 20 балів/ 12 балів
2. Практичні та семінари– РН 2., 3.– 12 балів/ 7 балів
3. Проміжне тестування РН 4. – 8 балів/ 5 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Формою проведення іспиту є тестова контрольна робота та співбесіда на основі неї. Результатами навчання, які оцінюються в тестовій контрольній роботі, є РН 1. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом практичних робіт. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 20 балів

### 7.2 Організація оцінювання:

Модульна контрольна робота проводиться після завершення лекцій. Проміжне тестування проводиться упродовж лекційного курсу. Оцінювання роботи студента з рішення задач проводиться на практичних заняттях у формі опитування.

### 7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59
Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

## 8. Структура навчальної дисципліни.

### Тематичний план лекцій та практичних занять

Номер і назва теми*	Кількість годин		
	лекції	практичні заняття	Самостійна робота
<i>Тема 1. Історично перші приклади розробки хемотерапевтичних препаратів на основі раціональних принципів (сальварсан, сульфамідні препарати, природні антибіотики)</i>	4		
<i>Самостійна робота. Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			10
<i>Тема 2. Приклади перших лікарських засобів, дизайн яких частково базувався на принципах структурно-базованого підходу (еналаприл, його аналоги)</i>	4		
<i>Практичне заняття 1. Доповідь на тему розробки нових лікарських засобів за матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>		2	
<i>Самостійна робота. Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			10
<i>Тема 3. Виникнення вискоєфективного скринінгу та його вплив на розвиток медичної хімії.</i>	4		
<i>Самостійна робота. Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			10
<i>Тема 4. Електронні бази даних, що містять структурну</i>	4		

<i>та іншу інформацію про протеїни як мішені лікарських засобів.</i> (Електронна база PDB, історія її створення, сучасний стан. Формат структурних даних про протеїни, що використовується в базі даних PDB (на прикладах). База даних ChEMBL, основні її компоненти. Спеціалізовані бази даних протеїнів (на прикладі бази GPCR.db)			
<b>Самостійна робота.</b> <i>Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			<b>4</b>
<b>Тема 5. Структурно-орієнтований дизайн у розробці препаратів – інгібіторів кіназ. Таргетні лікарські засоби для терапії раку.</b>	<b>4</b>		
<b>Практичне заняття 2.</b> <i>Доповідь на тему розробки нових лікарських засобів за матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>		<b>2</b>	
<b>Самостійна робота.</b> <i>Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			<b>4</b>
<b>Тема 6.,</b> <i>Ковалентні інгібітори ензимів – еволюція ідеї</i>	<b>4</b>		
<b>Самостійна робота.</b> <i>Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			<b>10</b>
<b>Тема 7. Приклад фрагментно-орієнтованого дизайну лікарських засобів на основі останніх даних з літератури</b>	<b>2</b>		
<b>Практичне заняття 3.</b> <i>Доповідь на тему розробки нових лікарських засобів за матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>		<b>2</b>	
<b>Самостійна робота.</b> <i>Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			<b>4</b>
<b>Тема 8. Приклад дизайну лікарських засобів на основі структури йонного каналу</b>	<b>2</b>		
<b>Самостійна робота.</b> <i>Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			<b>10</b>
<b>Тема 9. Технології, що базуються на використанні природних біохімічних механізмів.</b> (на прикладі PROTACS)	<b>2</b>		
<b>Практичне заняття 4.</b> <i>Доповідь на тему розробки нових лікарських засобів за матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>		<b>2</b>	
<b>Самостійна робота.</b> <i>Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>			<b>4</b>
<b>Тема 10. Технології, що базуються на використанні природних біохімічних механізмів</b> (На прикладі CAR-T)	<b>2</b>		
<b>Практичне заняття 5.</b> <i>Молекулярний докінг, основні поняття, методологія, програмне забезпечення.</i>		<b>2</b>	
<b>Самостійна робота.</b> <i>Самостійне проведення докінгу бібліотеки хімічних сполук по відношенню до мішені, обраної на вибір з запропонованих викладачем. Аналіз результатів і доповідь на практичному занятті (останньому в курсі) про отримані результати</i>			<b>34</b>

**Загальний обсяг 150 год., в тому числі:**

**Лекції – 28 год**

**Практичні – 22 год.**

**Самостійна робота - 100 год.**

## **9. Рекомендовані літературні джерела:**

### **Основна:**

[1] Jie Jack Li, Medicinal Chemistry for Practitioners. Wiley-VCH, 2019.

### **Додаткова:**

[1] G. L. Patrick. Medicinal Chemistry. Oxford University Press, N.-Y., 2005.

[2] Practice of Medicinal Chemistry (2nd Edition) Editor: Wermuth, C G. Elsevier, London, 2003.