

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»  
Заступник директора  
з навчальних робіт  
Грабчук Г.П.  
«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**Раціональний пошук лікарських засобів**  
(повна назва навчальної дисципліни)

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

вид дисципліни **обов'язкова**

|  |                   |
|--|-------------------|
| Форма навчання                             | <u>денна</u>      |
| Навчальний рік                             | <u>2022/2023</u>  |
| Семестр                                    | <u>третій</u>     |
| Кількість кредитів ECTS                    | <u>3</u>          |
| Мова викладання, навчання<br>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)

КИЇВ – 2022

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

**ЗАТВЕРДЖЕНО:**

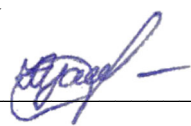
Зав. кафедри супрамолекулярної хімії

  
\_\_\_\_\_ (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

Основний лейтмотив курсу – сучасний раціональний пошук лікарських засобів з використанням даних про будову потенційних біологічних мішеней. На початку курсу студенти повторюють знайомі їм та вивчають нові методи дослідження будови біологічних мішеней – пептидів, нуклеїнових кислот (ядерний магнітний резонанс, мас-спектрометрія, рентгеноструктурний аналіз, мікроскопія). Далі відбувається знайомство та практичні роботи з основними електронними депозитаріями структур та іншої інформації про біологічні мішені (PDB, ChEMBL, Zinc, GPCR.db та інші). На наступному етапі 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:

ЗК 1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК 5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК 7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК 8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК 9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК 10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

ЗК 11. Здатність діяти на основі етичних міркувань (мотивів).

ЗК 12. Здатність працювати автономно.

ЗК 13. Здатність до активного збереження довкілля.

ЗК 14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

ФК 1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.

ФК 2. 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.

ФК 3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.

ФК 4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

ФК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

ФК 6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

ФК 7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).

ФК 8. 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.

ФК 9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

## 5. Результати навчання за дисципліною:

| Результат навчання<br>(1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4.<br>автономність та відповідальність) |   | Форми (та/або<br>методи і технології)<br>викладання і<br>навчання | Методи<br>оцінювання та<br>пороговий<br>критерій<br>оцінювання | Відсоток у<br>підсумкові<br>й оцінці з<br>дисципліни |
|--|---|---|--|--|
| Ко<br>д  | Результат навчання  |   |  |  |
| 1.   | <b>Знати:</b><br>1.1. основні методи дослідження будови біомолекул<br>1.2. основні прийоми сучасного раціонального пошуку лікарських засобів, що базуються на знаннях про будову біологічних мішеней. | Лекції  | Контрольні роботи  | 35%  |
| 2.   | <b>Вміти:</b><br>2.1. користуватися сучасними комп'ютерними програмами для докунгу та молекулярної динаміки, проводити віртуальний скринінг бібліотек хімічних сполук                                 | Практичні заняття   | Контрольні роботи  | 45%  |
| 3.   | 3.1. Вміти працювати в групі на семінарах та практичних роботах   | Практичні заняття   | Звіти  | 10%  |
| 4.   | 4.1. Вміти самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.   | Самостійна робота   | Контрольна робота  | 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.   | +                                    |            |            | +          | +          |

## 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

| № п/п | Номер і назва теми*   | Кількість годин |                   |                   |
|-------|---|-----------------|-------------------|-------------------|
|       |   | лекції          | практичні заняття | Самостійна робота |
| 1     | <b>Тема 1. Рентгеноструктурний аналіз біомолекул</b> (Рентгеноструктурний аналіз - основний метод сучасної структурної біології. Основні фізичні принципи рентгеноструктурного аналізу, закон Брега. Роздільна здатність рентгеноструктурного аналізу, способи генерації рентгенівських променів, отримання даних, детекція відображень, аналіз даних. Вирощування кристалів протеїнів. Метод «висячої краплі». Рентгеноструктурний аналіз мембранних протеїнів. Основні недоліки рентгеноструктурного аналізу біомолекул.) | 2               |                   |                   |
| 2     |   |                 |                   |                   |



|   |   |   |   |
|---|---|---|---|
| лікарських засобів, що фокусуються на структурному різноманітті. Синтез органічних сполук, що націлений на структурне різноманіття (Diversity-oriented synthesis, DOS). Використання багатокomпонентних реакцій в DOS. Використання багатофункціональних скафолдів, «доміно»-реакцій в DOS. Бібліотеки стереоізомерів в DOS. Використання природних сполук для отримання бібліотек структурно різноманітних сполук для біологічного скринінгу.      |   |   |   |
| <b>Практичне заняття 2.</b> Доповідь на тему розробки нових лікарських засобів за матеріалами наукової літератури, попередньо розіслані викладачем.   |   | 2 |   |
| <b>Самостійна робота.</b> Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розіслані викладачем.  |   |   | 4 |
| <b>Тема 6. Хіральність в дизайні лікарських засобів.</b> (Біологічна активність енантіомерів. Основні терміни – ютомер, дистомер, юдисмічний коефіцієнт\індекс. «Трьохточкова» модель взаємодії ліганд-рецептор для пояснення відмінності в біологічній активності енантіомерів, приклади. Бібліотеки стереоізомерів в пошуку оптимального ліганду для зв'язування з мішенню, приклади. Проблеми дизайну та розробки хіральних лікарських засобів.) | 2 |   |   |
| <b>Самостійна робота.</b> Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розіслані викладачем.  |   |   | 2 |
| <b>Тема 7. Приклад дизайну лікарських засобів на основі структури біологічної мішені.</b> (На основі актуальних наукових публікацій в галузі медичної хімії.)   | 2 |   |   |
| <b>Практичне заняття 3.</b> Доповідь на тему розробки нових лікарських засобів за матеріалами наукової літератури, попередньо розіслані викладачем.   |   | 2 |   |
| <b>Самостійна робота.</b> Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розіслані викладачем.  |   |   | 4 |
| <b>Тема 8. Приклад дизайну лікарських засобів на основі структури біологічної мішені.</b> (На основі актуальних наукових публікацій в галузі медичної хімії.)   | 2 |   |   |
| <b>Самостійна робота.</b> Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розіслані викладачем.  |   |   | 2 |
| <b>Тема 9. Приклад дизайну лікарських засобів на основі структури біологічної мішені.</b> (На основі актуальних наукових публікацій в галузі медичної хімії.)   | 2 |   |   |
| <b>Практичне заняття 4.</b> Доповідь на тему розробки нових лікарських засобів за матеріалами наукової літератури, попередньо розіслані викладачем.   |   | 2 |   |



|  |          |          |           |
|--|----------|----------|-----------|
| <b>Самостійна робота.</b> <i>Робота над матеріалами наукової літератури, попередньо розісланої викладачем.</i>   |          |          | <b>4</b>  |
| <b>Тема 10. Приклад дизайну лікарських засобів на основі структури біологічної мішені.</b> (На основі актуальних наукових публікацій в галузі медичної хімії.)   | <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 **90 год.**, в тому числі:

Лекції – **20 год**

Практичні – **10 год.**

Самостійна робота - **60 год.**

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

### **Основна:**

[1] Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, А.А. Варнек. Хемоинформатика (в 6-ти томах). Изд. Казанского университета, 2015.

### **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.