

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет
Кафедра органічної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи
В.О. Павленко

«квітень» 2018 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
МЕТОДИ СКРИНІНГОВОГО ПРОГНОЗУВАННЯ
БІОЛОГІЧНОЇ ПОВЕДІНКИ ПРИРОДНИХ СПОЛУК

для здобувачів освітньо-наукового рівня доктор філософії

галузі знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **третій "освітньо-науковий"**
освітня програма **Хімія**
вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання **денна**
Навчальний рік **2018/2019**
Період навчання **2 рік навчання**
Кількість кредитів ECTS **4**
Мова викладання,
навчання та оцінювання **українська**
Форма заключного контролю **іспит**

Викладач:

Ковтуненко Володимир Олексійович, доктор хімічних наук, професор кафедри органічної хімії

Пролонговано: на **2019/2020** н.р.

В.О. Павленко (Павленко) «05» 04 2019 р.

на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

на **2021/2022** н.р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.


КИЇВ – 2018

Розробник:

Ковтуненко Володимир Олексійович, д.х.н., проф., професор кафедри органічної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри органічної хімії

 (Хиля В.П.)

Протокол № 12 від "27" березня 2018 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від "25" квітня 2018 року

Голова науково-методичної комісії  (Амірханов В.М.)

"25" квітня 2018 року

ВСТУП

1. Мета дисципліни – розвиток уявлень про природні сполуки як джерела лідів та лікарських засобів.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

Знати: неорганічну хімію, органічну та фізичну хімію, основи хімії природних сполук та біоорганічної хімії на рівні випускника магістратури за спеціальністю «Хімія»; основні поняття медичної хімії та сучасних стратегій пошуку лікарських засобів на рівні випускника магістратури за спеціальністю «Хімія».

Вміти: обирати методологію вилучення та вивчення біологічної активності природної сполуки на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».

Володіти навичками пошуку інформації, її критичної обробки та представлення, застосовувати отримані знання для вирішення прикладних та теоретичних задач у галузі хімії.

3. Анотація навчальної дисципліни. В рамках дисципліни «Методи скринінгового прогнозування біологічної поведінки природних сполук» розглянуто принципи скринінгового прогнозування біологічної поведінки органічних молекул природного походження як складової частини стратегії пошуку нових лікарських засобів.

4. Завдання: сформувані цілісні уявлення про різноманіття біологічно активних сполук природного походження та, методи їх біологічний скринінг, у тому числі віртуального та стратегії оптимізації з метою створення нових лікарських засобів; сформувані навички розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики; сформувані здатність до пошуку, оброблення на аналізі інформації з різних джерел із використанням новітніх інформаційних і комунікаційних технологій та вміння проводити самостійні досліджень на сучасному рівні; сформувані здатність інтерпретувати дані, отримані при лабораторних експериментах та вимірюваннях і прив'язувати їх до відповідної теорії; сприяти розвитку абстрактного мислення, здатності формувати робочі гіпотези та перевіряти їх на практиці із застосуванням інноваційних технологій органічної хімії та суміжних дисциплін.

5. Результати навчання за дисципліною

Код	Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Метод и оціню- вання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати сучасні апаратні методи вилучення та ідентифікації природних сполук	лекції, аналітична робота	презентація, активність, Пс	15
1.2	Знати методи біологічного скринінгу	лекції, практичні,		10
1.3	Знати методи віртуального скринінгу	лекції, практичні, аналітична робота		15
2.1	Вміти обрати раціональну методіку вилучення органічних молекул із природної сировини	практичні		10
2.2	Вміти оцінити біологічну активність природної сполуки як наслідок її будови	лекції аналітична робота		15

2.3	Вміти прогнозувати біологічну активність речовини з використанням спеціалізованого програмного забезпечення	<i>практичні, доповідь, аналітична робота</i>		15
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації, що стосується скринінгу речовин природного походження	<i>лекції, практичні, аналітична робота</i>		5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання у співпраці з іншими виконавцями	<i>практичні, аналітична робота</i>		5
4.1	Вміти самостійно зафіксувати, проаналізувати та інтерпретувати дані, що стосуються скринінгу речовин природного походження	<i>практичні, аналітична робота</i>		5
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі скринінгу речовин природного походження	<i>практичні, аналітична робота</i>		5

6. В результаті вивчення дисципліни аспірант отримає нові сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі хімії природних сполук, які застосовуються для вилучення природних речовин та використання їх у якості сировини для створення лікарських засобів; відпрацює вміння формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції та здатність професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях.

Все це допоможе йому навчитись ініціювати, організовувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, пов'язаної із скринінгом речовин природного походження, що приведе до отримання нових знань та покращення вміння кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях в фахових виданнях, використовуючи при цьому сучасні інноваційні технології при плануванні експерименту, а також зборі, аналізі, обробці та інтерпретації експериментальних даних у галузі скринінгу речовин природного походження.

7. Схема формування оцінки

7.1. Результати навчальної діяльності аспірантів оцінюються за 100 - бальною шкалою. Модульний контроль включає 2 змістові модулі і комплексний підсумковий модуль (іспит). Впродовж навчання передбачається написання 2 модульних контрольних робіт; 2 практичні заняття та одне консультаційне.

- семестрове оцінювання:

презентація референсу останніх розробок, що стосуються скринінгу біологічно активних молекул природного походження;

модульна контрольна робота.

- підсумкове оцінювання: іспит.

Максимальна оцінка за семестр: **60 балів**.

Максимальна оцінка на іспиті: **40 балів**.

Максимальна загальна оцінка за курс: **100 балів**.

7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Іспит	
	Min. – 18 бали	Max. – 30 балів	Min. – 18 бали	Max. – 30 балів	Min – 24 бали	Max – 40 балів
Активність під час практичних занять	3	5	3	5		
Презентація	9	15	9	15		
Модульна контрольна робота 1	6	10				
Модульна контрольна робота 2			6	10		

Оцінка за презентацію включає в себе: теоретичне наповнення матеріалу (50% від загальної оцінки за презентацію), мультимедійне оформлення (25%), презентація матеріалу (25%).

До іспиту може бути допущений аспірант, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Методи скринінгового прогнозування біологічної поведінки природних сполук" (а саме: активність під час практичних робіт, презентація, написання контрольних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 20 балів (критично-розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів.

У випадку відсутності аспіранта з поважних причин відпрацювання пропущених занять та перездачі контрольних робіт здійснюються у відповідності до «Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу» від 1 жовтня 2010 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Шкала відповідності

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно з можливістю повторного складання / Fail	35-59
Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34

8. Структура навчальної дисципліни

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ ТА ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

№ теми	Назва теми	Кількість годин			
		лекції	практ.	конс.	самост. робота
Змістовий модуль 1.					
Вилучення та ідентифікація природних органічних молекул					
1	Природні сполуки як джерело лікарських засобів; висока селективність природних сполук як наслідок їх структурного різноманіття. Самостійна робота з літературою.	2	2		12
2	Традиційна медицина: історія та сучасність. Самостійна робота з літературою.	2			12
3	Збір природного матеріалу. Методи вилучення хімічних сполук з біомаси. Фракціонування і розділення речовин, вилучених із біомаси. Самостійна робота з літературою.	2			12
4	Основні спектральні методи ідентифікації природних сполук. Приклади практичного розв'язку задач зі спектральної ідентифікації природних сполук. Самостійна робота з літературою.	2			12
	Модульна контрольна робота 1	1		1	
Змістовий модуль 2.					
Методи скринінгового прогнозування					
5	Місце природних продуктів у терапевтичному арсеналі. Вибір рослин для біологічного дослідження в лабораторії. Фітохімічне дослідження рослин. Самостійна робота з літературою.	2	2		12
6	Основні підходи до вибору та скринінгу природних сполук як кандидатів для виявлення та розробки лікарських засобів: фармакологічний аспект; клінічні експерименти. Самостійна робота з літературою.	2			12
7	Прогнозування біологічної поведінки природних сполук з використанням комп'ютерних технологій. Самостійна робота з літературою.	2			12
8	Відомі препарати на природній основі та їх рослинні джерела. Самостійна робота з літературою.	2			12
	Модульна контрольна робота 2	1		1	
	ВСЬОГО	18	4	2	96

Загальний обсяг **120 год.**, в тому числі:

Лекцій – **18 год.**

Практичні заняття – **4 год.**

Консультації – **2 год.**

Самостійна робота - **96 год.**

9. Рекомендована література

Основна:

1. В. Д. Орлов, В. В. Липсон, В. В. Иванов. Медицинская химия. – Харьков: Фолио, 2005. – 461 с.
2. J. Alvarez, B. Shoichet. Virtual Screening in Drug Discovery. – CRC Press, Taylor & Francis Group, 2005.
3. H.-J. Bohm, G. Schneider. Virtual Screening for Bioactive Molecules. – Wiley-VCH, 2000.
4. G. L. Patrick. Medicinal Chemistry. Oxford University Press, N.-Y., 2005.
5. Practice of Medicinal Chemistry (2nd Edition) Editor: Wermuth, C G. Elsevier, London, 2003.
6. Lehninger A. L. Nelson D.L., Cox M. "PRINCIPLES OF BIOCHEMISTRY" 1993
7. Овчинников Ю.А. Биоорганическая химия. – М.: «Просвещение», 1987. – 815 с.
8. Ластухін Ю.О. Хімія природних органічних сполук. – Львів «Інтелект-Захід», 2004. – 560 с.
9. Кольман Я., Рем К.-Г. Наглядная биохимия, М., Мир, Бином. Лаборатория знаний, 2009. – 472 с.
10. Страйер Л. «Биохимия», 1985, М., Мир. 3Т.
11. Семенов А.А., Карцев В.Г. Основы химии природных соединений. Т.1. – М.: Издано Международным благотворительным фондом "Научное партнерство", 2009. – 624 с.
12. Ковтуненко В.О. Лікарські засоби з дією на центральну нервову систему. – Київ, Перун, 1997.- 462 с.
13. Ковтуненко В.О. Лікарські засоби з дією на периферійну нервову систему.- Київ, 2005. – 426 с.
14. Блажей А., Шутый Л. Фенольные соединения растительного происхождения.- М., 1977. - С. 28-31, 35-51, 198-229.
15. Казаков А.Л., Хиля В.П., Межерицкий В.В., Литкеи Ю. Природные и модифицированные изофлавоноиды. - Ростов н/Д, 1985. - 184 с.
16. Семенов А.А., Карцев В.Г. Основы химии природных соединений. Т.1. – М.: Издано Международным благотворительным фондом "Научное партнерство", 2009. – 624 с.

Додаткова:

17. M. Lahlou. Screening of natural products for drug discovery. Expert Opinion on Drug Discovery, 2007, Vol. 2 (5), P. 697–705. <https://doi.org/10.1517/17460441.2.5.697>.
18. Roland Barret (2018). Medicinal Chemistry: Fundamentals. London: Elsevier.
19. В.Г. Дрюк, В.Г. Карцев, В.П. Хиля. Курс органической химии. Биологические аспекты. Симферополь: ЧП «Фактор», 2007. – 242 с.
20. Flavonoids. Chemistry, biochemistry and applications. Edited by Q.M. Andersen, K.R. Markham. – CRC Press Taylor&Francis Group., 2006. – 1197 p.

а також інтернет-ресурси.