

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Хімічний факультет
Кафедра органічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи



[Signature] **Наталія УСЕНКО**

« 27 » 06 2024 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
СТВОРЕННЯ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ**
для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	магістр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2024/2025
Семестр	II, III
Кількість кредитів ECTS	6 (всього) 3 (II семестр) 3 (III семестр)
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма проміжного контролю	залік
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: **Григоренко Олександр Олегович**

Пролонговано: на 2025/2026 н. р. _____ (_____) «__» _____ 2025 р.

на 2026/2027 н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

Розробник:

Григоренко Олександр Олегович, д.х.н., професор, завідувач кафедри органічної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО


Завідувач кафедри органічної хімії

 Олександр ГРИГОРЕНКО

Протокол № 15 від 13 березня 2024 року

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 8 від 9 квітня 2024 року

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

«9» квітня 2024 року

1. Мета дисципліни – ознайомлення студентів із основними сучасними поняттями та методами створення лікарських засобів.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати органічну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
2. Мати уявлення про молекулярну біологію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».

3. Анотація навчальної дисципліни. В рамках курсу «Створення лікарських засобів» вивчаються сучасні підходи до створення лікарських засобів. Розглядаються основні поняття медичної хімії, основні біологічні мішені лікарських засобів (ензими, рецептори, йонні канали, транспортні протеїни та нуклеїнові кислоти, протеїн-протеїнові взаємодії), загальна сучасна схема створення лікарських засобів, стратегії та методи ідентифікації сполук-лідерів, сучасні технології пошуку лікарських засобів (зокрема, високоефективний скринінг та фрагментно-орієнтований пошук лікарських засобів та віртуальний скринінг), критерії відбору сполук для створення лікарських засобів.

4. Завдання. Формування у студентів знання та розуміння основних понять медичної хімії та сучасних підходів до створення лікарських засобів.

Навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей:

ЗК1 (знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності),

ЗК2 (здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями),

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

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).

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)	Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль ПтК (активність під час занять, виконання самостійної роботи, написання контрольних робіт), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати сучасну схему створення лікарських засобів	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	15
1.2	Знати основні поняття медичної хімії	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	25
1.3	Знати критерії відбору сполук для створення лікарських засобів	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10
2.1	Уміти знайти інформацію з методів створення лікарських засобів	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10
2.2	Уміти пояснити механізм дії лікарського засобу	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10
2.3	Уміти проаналізувати критерії відбору сполук для створення лікарських засобів	лекції, самостійні	ПтК, ПсК	10

3.1	Бути здатним використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації інформації стосовно методів створення лікарських засобів	самостійні	ПтК, ПсК	5
3.2	Бути здатним виконувати передбачені навчальною програмою завдання у співпраці з іншими виконавцями	самостійні	ПтК	5
4.1	Уміти самостійно зафіксувати, проаналізувати та інтерпретувати дані, що стосуються методів створення лікарських засобів	самостійні	ПтК, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил наукової етики та доброчесності в процесі критичної обробки наявної та створенні нової інформації у галузі створення лікарських засобів	самостійні	ПтК	5

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання:

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2
Програмні результати навчання										
ПРН1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+							+
ПРН2. 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.	+	+	+							
ПРН3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.				+	+	+			+	
ПРН4. Синтезувати хімічні сполуки із заданими властивостями, аналізувати їх і оцінювати відповідність заданим вимогам.				+	+	+			+	
ПРН8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.	+	+	+				+	+	+	+

ПРН13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.	+	+	+					+	+	+	+
---	---	---	---	--	--	--	--	---	---	---	---

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

II семестр

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані здобувачем освіти:

100 балів / 60 балів, а саме:

1. Контрольна робота № 1: РН 1.1–4.2 (частково) – **50 / 30 балів**

2. Контрольна робота № 2: РН 1.1–4.2 (частково) – **50 / 30 балів**

Підсумкове оцінювання (у формі заліку).

III семестр

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані здобувачем освіти:

100 балів / 60 балів, а саме:

1. Домашнє завдання РН 1.1–4.2 (частково) – **10 / 6 балів**

2. Контрольна робота: РН 1.1–4.2 (частково) – **50 / 30 балів**

3. Презентація: РН 1.1–4.2 (частково) – **40 / 24 балів**

Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом(кою): **40 балів / 24 бали**.

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1, 1.2, 1.3, 2.1, 2.2, 2.3, 3.2, 4.1.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 3 теоретичні питання.

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

Студент(ка) допускається до іспиту, якщо протягом семестру він (вона):

набрав(ла) не менше, ніж **36 балів**;

написав(ла) контрольну роботу та зробив(ла) презентацію.

7.2. Організація оцінювання

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота: не раніше 6 тижня семестру;

Презентація: не раніше 12 тижня семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
Відмінно / Excellent	90–100
Добре / Good	75–89
Задовільно / Satisfactory	60–74
Незадовільно / Fail	0–59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій

II СЕМЕСТР

№	Назва лекції	лекції	самост. робота
1	Тема 1. Основні поняття медичної хімії	2	2
	<i>Загальна сучасна схема створення лікарських засобів</i>		2
2	Тема 2. Основні біологічні мішені лікарських засобів	2	2
	<i>Ідентифікація біологічних мішеней</i>		4
3	Тема 3. Ліганди ензимів та рецепторів	2	2
	<i>Актуальні аспекти розробки лігандів ензимів та рецепторів</i>		2
4	Тема 4. Ліганди транспортних протеїнів	2	2
	<i>Класифікація транспортних протеїнів</i>		2
5	Тема 5. Біорегулятори, які впливають на нуклеїнові кислоти та регулюють протеїн-протеїнові взаємодії	2	2
	<i>Актуальні аспекти хімії нуклеїнових кислот</i>		4
6	Контрольна робота № 1	2	1
7	Тема 6. Актуальні аспекти ідентифікації сполук-лідерів	2	2
	<i>Ліганд- та структурно-орієнтований дизайн біологічно активних молекул</i>		2
8	Тема 7. Скринінгові технології	4	4
	<i>Високоєфективний та фенотиповий скринінг</i>		8
9	Тема 8. Природні сполуки у створенні лікарських засобів	2	4
	<i>Актуальні аспекти дизайну бібліотек сполук та будівельних блоків</i>		4
10	Тема 9. Фрагментно-орієнтований пошук лікарських засобів	4	4
	<i>Актуальні аспекти дизайну фрагментних бібліотек. Приклади еволюції фрагментних хітів</i>		4
11	Тема 10. Місце хімічних підприємств України у забезпеченні наукових розробок світової фармацевтичної галузі	2	2
12	Контрольна робота № 2	2	2
УСЬОГО		28 + 1 год конс.	61

Загальний обсяг – 90 годин, у тому числі:

Лекцій – 28 годин;

Консультації – 1 година;

Самостійна робота – 61 година.

ІІІ СЕМЕСТР

№	Назва лекції	лекції	самост. робота
1	Тема 1. Поняття про зв'язок «структура – активність» (SAR)	2	2
	<i>Принципи побудови SAR навколо потенційного лікарського засобу</i>		6
2	Тема 2. Дизайн аналогів	4	6
	<i>Принципи структурних модифікацій при оптимізації потенційного лікарського засобу</i>		6
3	Тема 3. Віртуальний скринінг	2	2
	<i>Молекулярний докінг. Використанні ШІ у створенні лікарських засобів</i>		2
4	Тема 4. Основи фармакокінетики	4	4
	<i>ADME параметри сполук</i>		4
5	Тема 5. Метаболізм лікарських засобів	2	2
	<i>Проліки</i>		2
6	Тема 6. Токсичність та побічні ефекти лікарських засобів	2	2
	<i>Методи визначення потенційної токсичності in vitro</i>		2
7	Контрольна робота	2	2
8	Тема 7. Нові лікарські засоби – інгібітори кіназ	2	2
	<i>Інгібітори кіназ, зареєстровані протягом останнього року</i>		2
9	Тема 8. Нові лікарські засоби – ліганди G-протеїн-зв'язаних рецепторів	2	2
	<i>Ліганди G-протеїн-зв'язаних рецепторів, зареєстровані протягом останнього року</i>		2
10	Тема 9. Нові лікарські засоби – інгібітори ензимів	2	2
	<i>Інгібітори ензимів, зареєстровані протягом останнього року</i>		2
11	Тема 10. Інші класи нових лікарських засобів	4	2
	<i>Представники інших класів нових лікарських засобів, зареєстровані протягом останнього року</i>		2
12	Презентація	2	3
УСЬОГО		28 + 1 год практ.	61

Загальний обсяг – **90** годин, у тому числі:

Лекцій – **28** годин;

Практичні – **1** година;

Самостійна робота – **61** година.

9. Рекомендовані джерела

Основні

1. Ковтуненко В. О. *Лікарські засоби з дією на центральну нервову систему*. – Київ, Перун, 1997. – 462 с.
2. Ковтуненко В. О. *Лікарські засоби з дією на периферійну нервову систему*. – Київ, 2005. – 426 с.
3. Воловенко Ю. М., Ковтуненко В. О. *Полімерний рівень організації матерії*. – Київ, 2013. – 335 с.
4. Ковтуненко В. О. *Вибрані розділи нейрохімії*, 2019. – 147 с.
http://organic.chem.univ.kiev.ua/upload/metod_neurochemistry_topics.pdf
5. Nelson D.L., Cox. M. M. *Lehninger Principles of Biochemistry*, 5th ed. – New York: W. H. Freeman and company. – 2008.
6. Wermuth C G. *The practice of medicinal chemistry*, 4rd ed. – Amsterdam/Boston: Elsevier. – 2015.
7. Patrick G. L. *An introduction to medicinal chemistry* , 6th ed. – Oxford: Oxford University Press. – 2017.
8. Corey E. J., Kürti L., Czako B. *Molecules and Medicine*. – Hoboken: John Wiley & Sons. – 2007.

Додаткові

9. База даних *Pubmed*, <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed>
10. База даних *DrugBank*, www.drugbank.ca
11. База даних *Drugs@FDA*, <https://www.accessdata.fda.gov/scripts/cder/daf/index.cfm>
12. Lowe D. Блог «*In the pipeline*», <https://blogs.sciencemag.org/pipeline/>
13. Erlanson D. Блог «*Practical fragments*», <http://practicalfragments.blogspot.com/>
14. Григоренко О.О. *Циклічні амінокислоти, їх похідні та аналоги – джерела сполук для створення лікарських засобів*. – Дис. на здоб. наук. ступеня д-ра хімічних наук. – Київ, 2019.
15. Grygorenko O. O., Volochnyuk D. M., Ryabukhin S. V., Judd D. B. *The symbiotic relationship between drug discovery and organic chemistry*. – Chem. Eur. J., 2022, 26, 1196–1237. DOI: 10.1002/chem.201903232.