

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Методы органической и медицинской химии в оптимизации структурных
прототипов лекарств**

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Медицинская химия и тонкий органический синтез

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Методы органической и медицинской химии в оптимизации структурных прототипов лекарств**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по практике, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
СПК-1.С Способность применять основные принципы конструирования лекарственных веществ для оптимизации физиологической активности структурных прототипов лекарств и улучшения их фармакокинетических характеристик	Знать: приемы изменения структуры разрабатываемого вещества с целью улучшения его активности, селективности и улучшения фармакокинетических характеристик Владеть: навыками направленной модификации соединения-лидера для создания соединений с заданной активностью Уметь: устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью
СПК-3.С Способность выбирать методы синтеза и определения физиологической активности веществ <i>in vivo</i> и <i>in vitro</i> и интерпретировать результаты биотестирования	Знать: основные подходы к аналоговому (в том числе комбинаторному) синтезу физиологически активных веществ, включая пептидомиметики, пролекарства и двойные лекарства Уметь: разрабатывать схемы синтеза потенциальных физиологически активных веществ Владеть: навыками интерпретации результатов биотестирования из научных статей по медицинской химии

<p>СПК-5.С Владение теоретическими основами методов предсказания физиологической активности веществ и навыками интерпретации качественных зависимостей «структура – активность», применение их при решении практических задач</p>	<p>Знать: основные приемы анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера Уметь: давать приблизительную оценку возможной физиологической активности аналогов соединения-лидера на основании известных данных «структура – активность» Владеть: навыками критического анализа подходов и методов модификации соединений-лидеров из научных статей по медицинской химии</p>
--	--

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 62 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (28 часов занятия лекционного типа, 28 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 82 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: основные естественнонаучные дисциплины в рамках образовательной программы бакалавра, главным образом, органическую химию, неорганическую химию и аналитическую химию, а также основные аспекты медицинской химии (дизайна структур лекарственных веществ)

Уметь: ориентироваться в многообразии биологических мишеней, интерпретировать качественные зависимости «структура – активность», пользоваться химической литературой и современными интернет-ресурсами

Владеть: базовыми навыками дизайна структур лекарственных веществ, синтеза и анализа органических веществ, работы с компьютерными программами

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

<p>Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттеста-</p>	<p>Всего (часы)</p>	<p>В том числе</p>	
		<p>Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них</p>	<p>Самостоятельная работа обучающегося, часы из них</p>

		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации (*)	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Раздел 1. Комбинаторный синтез аналогов соединения-лидера. Комбинаторные библиотеки.	26	6	8				14	12		12
Раздел 2. Общие подходы к созданию аналогов соединения-лидера. Эмпирические приемы модификации его структуры.	32	10	8				18	14		14
Раздел 3. Особые случаи создания аналогов соединения-лидера.	32	10	8				18	14		14
Раздел 4. Стереохимические аспекты в дизайне лекарственных веществ.	18	2	4	2			8	10		10
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>	36					4	4			32
Итого	144	28	28	2		4	62			82

(*) текущий контроль проводится во время семинарских занятий

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

1. О.Н. Зефирова. Основные понятия и термины медицинской химии (под ред. акад. Н.С. Зефирова). Методическое пособие. М., Цифровичок, 2013.
2. О.Н. Зефирова. Об истории возникновения и развития концепции изостеризма. Вестник Моск. Ун-та. 2002, т. 43, № 4. С 251–256.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. The Practice of Medicinal Chemistry (eds. C. Wermuth, D. Aldous, P. Raboisson, D. Rognan) 4th Edition. 2015, Academic Press, 902 pp. G.A. Patani, E.J. LaVoie. Bioisosterism: A rational approach in drug design. Chemical Reviews. 1996, vol. 96, N 8, P. 3147–3176. Chemical Reviews, 1997, Vol. 97, No 2 (номер журнала посвящен комбинаторной химии, на стр. 347–348 – вводная статья).
2. K. Stromgaard, P. Krogsgaard-Larsen, U. Madsen. Textbook of Drug Design and Discovery, 4th edition, US: Boca Raton, FL, CRC Press/Taylor & Francis. 2010, 476 pp.
3. Journal of Medicinal Chemistry

Дополнительная литература

1. Thomas L. Lemke, David A. Williams. Foye's Principles of Medicinal Chemistry. 6th edition, 2007, US: Lippincott, Williams & Wilkins, 1400 pp.
2. Medicinal Chemistry eds. T.Gareth 2th Edition, 2007, JohnWiley, 646 pp.

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели: проф. Зефирова Ольга Николаевна, проф. Томилова Лариса Годвиговна, м.н.с. Зефиров Николай Алексеевич

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение компетенций (в части ЗУВ), перечисленных в п.5.

Вопросы к экзамену:

1. Комбинаторные библиотеки, принципы их формирования.
2. Твердофазный параллельный синтез, его особенности, достоинства и недостатки. Примеры применения в аналоговом синтезе.
3. Жидкофазный параллельный синтез, его особенности, достоинства и недостатки. Примеры применения в аналоговом синтезе.
4. Эмпирические правила биоизостерической замены. Классические и неклассические биоизостеры.
5. Гомологические серии. Биологическая активность в гомологических сериях.
6. Серии винилогов и этинологов. Винилогия как ретранслятор химических свойств модифицируемых функциональных групп.
7. Серии бензологов и азабензологов.
8. Трансформация колец. Циклические и «открытые» аналоги. Реорганизация циклических систем.
9. Методы ограничения конформационной подвижности молекулы.
10. Стратегии создания пептидомиметиков.
11. Пролекарства и биопредшественники. Группировки-носители в пролекарствах и их направленная модификация.
12. Двойные лекарства и лекарства двойного действия и методы их дизайна.
13. Оптическая изомерия и физиологическая активность. Эудесмическое соотношение, правило Пфайффера. Подходы, направленные на удаление хиральных центров в структурах лекарственных веществ.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: приемы изменения структуры разрабатываемого вещества с целью улучшения его активности, селективности и улучшения фармакокинетических характеристик</p> <p>Знать: основные подходы к аналоговому (в том числе комбинаторному) синтезу физиологически активных веществ, включая пептидомиметики, пролекарства и двойные лекарства</p> <p>Знать: основные приемы анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Уметь: устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью</p> <p>Уметь: разрабатывать схемы синтеза потенциальных физиологически активных веществ</p> <p>Уметь: давать приблизительную оценку возможной физиологической активности аналогов</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>

соединения-лидера на основании известных данных «структура – активность»	
<p>Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть: навыками направленной модификации соединения-лидера для создания соединений с заданной активностью</p> <p>Владеть: навыками интерпретации результатов биотестирования из научных статей по медицинской химии</p> <p>Владеть: навыками критического анализа подходов и методов модификации соединений-лидеров из научных статей по медицинской химии</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>