

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

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/
«31» августа 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Основные аспекты медицинской химии

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 №7 от 07.07.2021)

Москва 2021

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 29 декабря 2018 года № 1770 (с изменениями по приказу № 1109 от 11.09.2019).

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021, 2021/2022

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>ОПК-1.С. Способен решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>ОПК-1.С.1. Воспринимает информацию химического содержания, систематизирует и анализирует ее, оценивает актуальность и степень новизны данных</p>	<p>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</p>
<p>СПК-2.С. Способен выдвигать концепции направленной структурной модификации соединения-лидера в зависимости от наличия информации о его молекулярной мишени в организме</p>	<p>СПК-2.С.1 оценивает возможность структурной модификации соединения-лидера на основании имеющейся информации</p>	<p>Знать: базовую стратегию создания лекарственных веществ в современном мире и ее принципиальное отличие от традиционного поиска лекарственных средств Уметь: выдвигать концепции направленной структурной модификации соединения-лидера Владеть: базовыми навыками дизайна структур лекарственных веществ</p>

<p>СПК-3.С. Способен выбирать методы синтеза и определения физиологической активности веществ <i>in vivo</i> и <i>in vitro</i> и интерпретировать результаты биотестирования</p>	<p>СПК-3.С.1 проводит сравнительный анализ возможностей разных методов синтеза веществ <i>in vivo</i> и <i>in vitro</i>, предлагает оптимальные методы синтеза и определения физиологической активности</p>	<p>Знать: принципы получения аналогов соединений-лидеров с противовирусной, противораковой, противоопухолевой, анальгетической, антигистаминной, антибактериальной и гормоноподобной активностью Уметь: ориентироваться в многообразии биологических мишеней Владеть: навыками критического анализа статей из основных мировых журналов по медицинской химии</p>
<p>СПК-5.С. Владеет теоретическими основами методов предсказания физиологической активности веществ и навыками интерпретации качественных зависимостей «структура – активность», применение их при решении практических задач</p>	<p>СПК-5.С.3 прогнозирует и интерпретирует физиологическую активность веществ с использованием качественных зависимостей «структура – активность»</p>	<p>Знать: рациональные подходы к созданию лекарственных веществ, действующих как ингибиторы ферментов, агонистов или антагонистов различных рецепторных систем, интеркаляторов в ДНК и ДНК-алкилирующих агентов Уметь: интерпретировать качественные зависимости «структура – активность» Владеть: навыками приблизительной оценки фармакокинетических и фармакодинамических свойств веществ</p>

3. 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 84 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (54 часа занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа, 4 часа – групповые консультации, 4 часа - промежуточный контроль успеваемости), 64 часа составляет самостоятельная работа студента.

4. 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

Уметь: пользоваться химической литературой и современными интернет-ресурсами

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

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
	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. Основные понятия и термины медицинской химии. Стратегии поиска и генерирования соединений-лидеров.	4	4	-				4			
Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств и принципы создания структур лигандов этих мишеней.	36	30	-	2			32	4		4

Раздел 3. Вариации структур лекарственных веществ для улучшения фармакокинетических характеристик. Количественная характеристика биологической активности.	10	6	-				6	4		4
Раздел 4. Принципы конструирования структур отдельных типов лекарственных препаратов.	58	14	18	2			34	24		24
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>	36					4	4			32
Итого	144	54	18	4		4	80			64

(*) текущий контроль осуществляется во время семинарских занятий

6. 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.

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

- О.Н. Зефирова. Основные понятия и термины медицинской химии (под ред. акад. Н.С. Зефирова). Методическое пособие. М.:Цифровичок, 2013, 40 с.
- О.Н. Зефирова, Н.С. Зефиров. Физиологически активные соединения, взаимодействующие с глутаматными рецепторами. *Журнал Органической Химии*. 2000, Т. 36, вып.9, С. 1273–1300.
- О.Н. Зефирова, Н.С. Зефиров. Физиологически активные соединения, взаимодействующие с серотониновыми (5-гидрокситриптаминавыми) рецепторами. *Успехи химии*. 2001, т. 70, № 4, С. 382–407.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

- G. Patrick. An introduction to medicinal chemistry. 5th edition, Oxford, Oxford University Press, 2013, 789 pp.
- 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.
- Journal of Medicinal Chemistry
- О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин. Органическая химия. В 4-х томах. Москва. Бином. Лаборатория знаний. 2021.

Дополнительная литература

1. Th.L. Lemke, D.A. Williams. Foye's Principles of Medicinal Chemistry. 6th edition, 2007, US: Lippincott, Williams & Wilkins, 1400 pp.
2. Е.В. Румянцев, Е.В. Антина, Ю.В. Чистяков. Химические основы жизни. М.: Химия, КолосС, 2007. 560 с.
3. С. Д. Варфоломеев, К. Г. Гуревич. Биокинетика. М.: ФАИР-ПРЕСС, 1999. 720 с.
4. М.Дж. Нил. Наглядная фармакология: пер. с англ. под ред. Р.Н. Аляутдина. М., ГЭОТАР–Медиа. 2008. 104 с.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: д.х.н., проф. Зефирова Ольга Николаевна

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 для экзамена:

- Основные стратегии поиска лекарственных веществ в современном мире. Эмпирические стратегии поиска соединения-лидера. Комбинаторные библиотеки.
- «Рациональные» стратегии поиска соединения-лидера. Оценка качества соединения-лидера.
- Мишени действия лекарственных веществ в организме. Подходы к созданию структур веществ, нарушающих целостность

- клеточных мембран.
- Мишени действия лекарственных веществ в организме. Структурный дизайн лигандов ДНК
- Общие представления о подходах к оптимизации соединения-лидера. SAR, QSAR, эмпирические подходы к структурной модификации, молекулярное моделирование.
- Белки как мишени действия лекарственных веществ. Понятие фармакофора.
- Подходы к созданию структур ингибиторов ферментов.
- Подходы к созданию структур агонистов и антагонистов рецепторных белков
- Методы модификации структур химических веществ для улучшения их фармакокинетических параметров.
- Количественные характеристики биологической активности. Представление о способах биотестирования лекарственных веществ *in vitro* и *in vivo*.
- Токсофорные группировки. Соединения, дающие ложноположительные результаты тестирования.
- Подходы к созданию структур веществ, обладающих антибактериальной активностью.
- Подходы к созданию структур веществ, обладающих противоопухолевой активностью.
- Подходы к созданию структур веществ, обладающих антивирусной активностью.
- Подходы к созданию структур веществ, обладающих анальгетической активностью.
- Подходы к созданию структур гормоноподобных веществ.
- Подходы к созданию структур веществ, обладающих другими типами активности.

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 не принципиального 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: базовую стратегию создания лекарственных веществ в современном мире и ее принципиальное отличие от традиционного поиска лекарственных средств</p> <p>Знать: принципы получения аналогов соединений-лидеров с противовирусной, противораковой, противоопухолевой, анальгетической, антигистаминной, антибактериальной и гормоноподобной активностью</p> <p>Знать: рациональные подходы к созданию лекарственных веществ, действующих как ингибиторы ферментов, агонистов или антагонистов различных рецепторных систем, интеркаляторов в ДНК и ДНК-алкилирующих агентов</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: выдвигать концепции направленной структурной модификации соединения-лидера</p> <p>Уметь: ориентироваться в многообразии биологических мишеней</p> <p>Уметь: интерпретировать качественные зависимости «структура – активность»</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<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: базовыми навыками дизайна структур лекарственных веществ</p> <p>Владеть: навыками критического анализа статей из основных мировых журналов по медицинской химии</p> <p>Владеть: навыками приблизительной оценки фармакокинетических и фармакодинамических свойств веществ</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>