

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)
Спецпрактикум «Медицинская химия и тонкий органический синтез»

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-3.С. Владеет методами регистрации и обработки результатов экспериментов, в том числе, полученных на современном научном оборудовании</p>	<p>ОПК-3.С.2. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений</p>	<p>Уметь: проводить обработку экспериментальных данных, обобщать полученные результаты</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: основные методы доказательства строения веществ для последующего биотестирования Уметь: определять структуры веществ (в том числе лекарственных субстанций) на основании данных ЯМР спектроскопии Владеть: навыками работы с простейшими программами виртуального скрининга</p>
<p>СПК-4.С. Владеет теоретическими и практическими навыками синтеза и установления строения органических веществ (в том числе гетероциклических) с потенциальной физиологической активностью, использование их при решении задач профессиональной деятельности</p>	<p>СПК-4.С.1 проводит синтез веществ с потенциальной физиологической активностью</p>	<p>Знать: основные подходы к синтезу и очистке веществ для последующего биотестирования Уметь: реализовывать схемы синтеза потенциальных физиологически активных веществ Владеть: навыками воспроизведения известные методик синтеза физиологически активных 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 8 зачетных единицы, всего 288 часов, из которых 212 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (186 часов – практические занятия, 24 часа – индивидуальные консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 76 часов 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 (лабораторные)	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.

Тема 1. Методы анализа структур физиологически активных веществ.	56		36		8		44	12		12
Тема 2. Методы виртуального скрининга для поиска соединений-лидеров	18		14				14	4		4
Тема 3. Применение каскадных реакций в современной органической химии	62		36		8		44	12	6	18
Тема 4. Реакции Михаэля как стратегическая реакция в полном органическом синтезе природных объектов	48		36				36	12		12
Тема 6. Современные методы создания углерод-углеродной связи	62		36		8		44	12	6	18
Тема 5. Методы синтеза энантиомерно чистых соединений	40		28				28	6	6	12
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	288		186		24	2	212			76

6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- 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):

1. И.Э. Нифантьев, П.В. Ивченко. Практический курс спектроскопии ЯМР. Методическая разработка. М., 2006, 200 с.

2. Спектроскопия ЯМР в фармацевтическом анализе. Хим.-фарм. журн. 1990. Т. 24, №№ 4,5. Хим.-фарм. журн. 1991. Т. 25, №№6,7,8, 10. Хим.-фарм. журн. 1992. Т. 26, №№ 4, 5.

3. М.А. Юровская, А.В. Куркин, Н.В. Лукашев. Химия ароматических гетероциклических соединений, Методическая разработка, М. 2007, 50 с

4. В.А. Смит, А.Д. Дильман. Основы современного органического синтеза. Бином Лаборатория знаний, 2009, 750 с

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. NMR spectroscopy in pharmaceutical analysis (eds. U. Holzgrabe, I. Wawer, B. Diehl). 2008, Amsterdam, Elsevier Science, 2008, 528.

2. Д. Марч. Органическая химия. Реакции, механизмы и структура (4 тома), Мир, 1987, 1520 с.

3. Смит В. А., Дильман А. Д. Основы современного органического синтеза. Издательство "Лаборатория знаний" (ранее "БИНОМ. Лаборатория знаний"), 2020 г.

Дополнительная литература

1. Ch. Dickson. Medicinal Chemistry Laboratory Manual (investigations in biological and pharmaceutical chemistry). CRC Press, N.W. Boca Raton, Florida, 1999, 215 с.

2. P. Vogel, K.N. Houk. Organic Chemistry: Theory, Reactivity and Mechanisms in Modern Synthesis John Wiley & Sons, Inc., 2018, 1678

Оборудование, используемое при выполнении задач спецпрактикума:

Весы Adventure Ohaus RV 214 - 1 шт.; Весы VIBRA HTR-220CE - 1 шт.; Испаритель роторный ИКА RV10 - 2 шт.; Мешалка механическая ИКА RV16 - 8 шт.; Мешалка магнитная ИКАС-MAGHS10 - 8 шт.; Мешалка магнитная ММ-ЛБ-24(Китай) - 7 шт.; Насос вакуумный Vacuumbrand RE-6 - 1 шт.; Рефрактометр - 1 шт.; Спектрофотометр - 1 шт.; Компьютер Pentium 4 - 1 шт.; Лампа УФ - 1 шт.; Прибор для определения температуры плавления - 1 шт.

Холодильник - 1 шт.; Компьютер Pentium 4 - 1 шт.; Весы Adventure Ohaus RV 214 - 1 шт.; Весы VIBRA HTR-220CE - 1 шт.; Испаритель роторный ИКА RV10 - 2 шт.; Мешалка механическая ИКА RV16 - 8 шт.; Мешалка магнитная ИКАС-MAGHS10 - 8 шт.; Мешалка магнитная ММ-ЛБ-24(Китай) - 7 шт.; Насос вакуумный Vacuumbrand RE-6 - 1 шт.; Рефрактометр RMT - 1 шт.; Спектрофотометр - 1 шт.; Холодильник - 1 шт.

Мешалка механическая ИКА RV16 - 8 шт.; Мешалка магнитная ИКАС-MAGHS10 - 8 шт.; Мешалка магнитная ММ-ЛБ-24(Китай) - 7 шт.; Холодильник - 1 шт.; Компьютер Pentium 4 - 1 шт.; Спектрофотометр - 1 шт.; Весы Adventure Ohaus RV 214 - 1 шт.; Весы VIBRA HTR-220CE - 1 шт.; Испаритель роторный ИКА RV10 - 2 шт.; Насос вакуумный Vacuumbrand RE-6 - 1 шт.; Рефрактометр - 1 шт.

Спектрофотометр - 1 шт.; Компьютер Pentium 4 - 1 шт.; Рефрактометр RMT - 1 шт.; Весы Adventure Ohaus RV 214 - 1 шт.; Испаритель роторный ИКА RV10 - 2 шт.; Мешалка механическая ИКА RV16 - 8 шт.; Мешалка магнитная ИКАС-MAGHS10 - 8 шт.; Ме-

шалка магнитная ММ-ЛБ-24(Китай - 7 шт.; Насос вакуумный VacuumbrandRE-6 - 1 шт.
Компьютер Pentium 4 - 1 шт.; Спектрофотометр - 1 шт.; Рефрактометр RMT - 1 шт.; Насос вакуумный Vacuumbrand RE-6 - 1 шт.;

12. **Язык преподавания** – русский

13. **Преподаватели:** доцент Куркин Александр Витальевич, мл. науч. сотр. к.х.н. Зефилов 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 промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы к зачету:

1. Метод спектроскопии ЯМР ^1H для определения структур лекарственных и потенциальных физиологически активных веществ.
2. Метод спектроскопии ЯМР ^{13}C для определения структур лекарственных и потенциальных физиологически активных веществ.
3. Методы ИК спектроскопии и масс-спектрометрии для определения структур лекарственных и потенциальных физиологически активных веществ.
4. Определение структуры вещества по заданным преподавателем брутто-формуле и спектральным данным.
5. Определение структуры вещества по заданной преподавателем брутто-формуле и самостоятельно обработанным спектральным данным.
6. Выбор соединения методом виртуального скрининга из заданной преподавателем базы структур и молекулярной мишени.
7. Выбор соединения методом виртуального скрининга из собственной базы структур и заданной преподавателем молекулярной мишени.
8. Методы образования углерод-углеродной связи с использованием катализа комплексами палладия (Реакция Стилле, Сузуки, Соногаширы)
9. Использование азотсодержащих производных альдегидов и кетонов для обеспечения хемо-, регио- и стереоселективности реакций α -алкилирования.
10. Альдольная реакция. Основной и кислый катализ. Литиевые еноляты и силиловые еноляты (Реакция Мукаямы). Диастереоселективность, асимметрический катализ, вспомогательные реагенты Эванса. Органокатализ.
11. Реакция Михаэля. Акцепторы Михаэля в реакциях с гетероатомными нуклеофилами и C-нуклеофилами. Селективность присоединения карбанионных реагентов. Каталитическая асимметрическая реакция Михаэля.
12. Перегруппировка Кляйзена и перегруппировка Коупа как примеры каскадных реакций. Основные закономерности. Комбинации сигматропных перегруппировок. Сигматропные перегруппировки в биохимических процессах.

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
Знать: основные методы доказательства строения веществ для последующего биотестирования Знать: основные подходы к синтезу и очистке веществ для последующего биотестирования	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете и при сдаче задачи
Уметь: проводить обработку экспериментальных данных, обобщать полученные результаты Уметь: определять структуры веществ (в том числе лекарственных субстанций) на основании данных ЯМР спектроскопии Уметь: реализовывать схемы синтеза потенциальных физиологически активных веществ	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете и при сдаче задачи
Владеть: навыками работы с простейшими программами виртуального скрининга Владеть: навыками воспроизведения известные методик синтеза физиологически активных веществ	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете и при сдаче задачи