

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра молекулярної і медичної біофізики

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної  
роботи  
Антон ПАНТЕЛЕЙМОНОВ



\_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

Робоча програма навчальної дисципліни

ОСНОВИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЇ ФАРМАКОЛОГІЇ ТА ДРАГ-ДИЗАЙН

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти \_\_\_\_\_ другий (магістерський) \_\_\_\_\_

галузь знань \_\_\_\_\_ 10 Природничі науки \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)

спеціальність \_\_\_\_\_ 105 Прикладна фізика та наноматеріали \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)

освітня програма \_\_\_\_\_ "Біофізика" \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)

спеціалізація \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)

вид дисципліни \_\_\_\_\_ за вибором \_\_\_\_\_  
(обов'язкова / за вибором)

факультет радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

2021 / 2022 навчальний рік


Програму рекомендовано до затвердження вченою радою факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем.  
25 червня 2021 року, протокол №8.

**РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:**

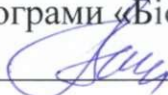
Боріков Олексій Юрійович, кандидат біологічних наук, доцент кафедри молекулярної і медичної біофізики.

Програму схвалено на засіданні кафедри молекулярної і медичної біофізики.  
Протокол від 07 червня 2021 року № 6.

Завідувач кафедри молекулярної і медичної біофізики

  
\_\_\_\_\_ Володимир БЕРЕЕСТ

Програму погоджено з гарантом освітньої-професійної програми «Біофізика».  
Гарант освітньої професійної програми «Біофізика»

  
\_\_\_\_\_ Володимир БЕРЕЕСТ

Програму погоджено методичною комісією факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем.

Протокол від 17 червня 2021 року № 6.

Голова методичної комісії факультету радіофізики, біомедичної електроніки та комп'ютерних систем

  
\_\_\_\_\_ Леонід ЧОРНОГОР

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Драг-дизайн та основи експериментальної фармакології» складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки магістрів

Зі спеціальності 105-прикладна фізика та наноматеріали

За освітньо-професійною програмою «біофізика»

### 1. Опис навчальної дисципліни

Окрім фундаментальних знань з медичної хімії, у програмі курсу подано матеріал із практичного застосування здобутих знань з розробки та дослідження нових ліків у фармацевтичній промисловості. Знання, здобуті в результаті засвоєння курсу, можуть бути використані випускниками кафедри в подальшій практичній діяльності в сучасній біотехнології та генній інженерії. З огляду на це до програми курсу з урахуванням міждисциплінарних зв'язків залучено теми із суміжних дисциплін, зокрема, молекулярної біології, біоінформатики та біоорганічної хімії.

1.1. **Метою курсу** є оволодіння здобувачами базовими знаннями, основними поняттями й теоретичними засадами сучасних технологій розробки нових лікарських засобів, вироблення умінь і навичок застосовувати здобуті знання у винайденні та дослідженні нових лікарських препаратів.

1.2 Основні завдання курсу є ознайомлення студентів з основами сучасної технології розробки нових ліків; поглиблене теоретичне вивчення раціонального дизайну ліків. У результаті вивчення курсу здобувачі повинні знати принципи структурно- і ліганд-орієнтованого дизайну ліків, підходи до оптимізації фармакокінетичних та фармакодинамічних властивостей ліків; останні досягнення в галузі розробки нових ліків.

1.3. Кількість кредитів – 4

1.4. Загальна кількість годин - 120

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
2-й	-й
Семестр	
3-й	-й
Лекції	
36 год.	-год.
Практичні заняття	
12 год.	- год.
Самостійна робота	
72 год.	-год.

1.6. Заплановані результати навчання

*Знати:* сучасний арсенал лікарських засобів, головні принципи дизайну нових молекулярних структур потенційних ліків, основи застосування базового програмного забезпечення для комп'ютерного моделювання потенційного лікарського препарату і доступу до них.

*Вміти:* самостійно застосовувати здобуті знання для емпіричного та комп'ютерного дизайну лікарських речовин, аналізувати сучасні тенденції зі створення новітніх програм з молекулярного моделювання лікарських препаратів і їх фармакологічних блоків, орієнтуватися в

масиві сучасних інформаційно-довідкових та пошукових системах і доступних базах даних з дизайну лікарських препаратів, вести наукову дискусію про можливі й оптимальні

## 2. Тематичний план навчальної дисципліни

**Тема 1.** Історичний огляд розвитку фармакологічної науки. Основні методології, що використовувалися і використовуються для пошуку та розробки нових лікарських засобів.

**Тема 2.** Загальні принципи раціонального молекулярного дизайну. Поняття про сполуки хіти, лідери та кандидати у лікарські засоби. Високоєфективний фармакологічний скринінг. Віртуальний скринінг.

**Тема 3.** Ліганд-орієнтований дизайн лікарських засобів. Теорія фармакофорів. Кількісна оцінка залежності структура-біологічна активність.

**Тема 4.** Мішень-орієнтований дизайн лікарських засобів. Інструменти молекулярного докінгу *in silico*. Підготовка ліганду і білка-мішені до докінгу.

**Тема 5.** Фрагмент-орієнтований дизайн лікарських засобів.

**Тема 6.** Фармакокінетика лікарських засобів. Гостра та хронічна токсичність. Основні принципи проведення доклінічних фармакологічних досліджень на лабораторних тваринах.

**Тема 7.** Фармакодинаміка. Основні механізми дії лікарських засобів. Дослідження фармакологічної ефективності лікарського засобу *in vivo*.

**Тема 8.** Моделювання основних патологічних станів людини на лабораторних тваринах. Хірургічні, хімічні, фармакологічні та генетичні моделі.

## 3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин			
	денна форма			
	усього	у тому числі		
л		прак	і р	
Тема 1.	4	4	-	
Тема 2.	7	4	3	
Тема 3.	7	4	3	
Тема 4.	7	4	3	
Тема 5.	7	4	3	
Тема 6.	4	4	-	
Тема 7.	6	6	-	
Тема 8.	6	6	-	
Разом:	48	36	12	

## 4. Методи контролю

Контрольні роботи, практичні завдання.

## 5. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання								Контрольна робота, передбачена навчальним планом	Екзамен (залікова робота)	Сума
Розділ 1				Розділ 2						
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	15	50	100
5	5	5	5	5	5	5	5			

## 6. Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка	
	для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	Незадовільно	не зараховано

### Критерії оцінки успішності студентів при семестровому контролі та виконанні письмових робіт

**Оцінку «відмінно» (5 балів – за завдання; 90-100 балів за курс у цілому)** отримує студент, якщо він:

- міцно засвоїв зміст навчальної дисципліни, наукових першоджерел і рекомендованої літератури;
- вміє повністю, глибоко і всебічно розкрити зміст матеріалу, поставленого завдання чи проблеми; комплексно вирішувати поставлені завдання чи проблему; правильно застосовує одержані знання з різних дисциплін для вирішення завдань чи проблем; послідовно і логічно викладає матеріал;
- висловлює обґрунтоване власне ставлення до тих чи інших проблем;
- чітко розуміє зміст і вільно володіє спеціальною термінологією; встановлює взаємозв'язок основних понять;
- грамотно ілюструє відповіді прикладами;
- вільно використовує набуті теоретичні знання для аналізу практичного матеріалу; демонструє високий рівень набутих практичних навичок.

Допускається декілька неточностей у викладенні матеріалу, які не приводять до помилкових висновків і рішень.

**Оцінку «добре» (4 бали – за завдання; 70-89 балів за курс у цілому)** отримує студент, якщо він:

- добре засвоїв основний зміст навчальної дисципліни, основні ідеї наукових першоджерел і рекомендованої літератури;
- аргументовано, правильно та послідовно розкриває основний зміст матеріалу;
- висловлює власні міркування з приводу тих чи інших проблем;
- точно використовує термінологію;
- має практичні навички з аналізу матеріалу.

Допускається декілька неточностей у використанні спеціальної термінології, похибок у логіці викладу теоретичного змісту або аналізу практичного матеріалу,

несуттєвих та не грубих помилок у висновках та узагальненнях, що не впливають на конкретний зміст відповіді. Наявні неточності та помилки враховуються при визначенні оцінки за 100-бальною шкалою та відповідної літери В або С.

**Оцінку «задовільно» (3 бали – за завдання; 50-69 балів за курс у цілому)** студент отримує, якщо:

- у відповіді суть запитання в цілому розкрита, але зміст питання викладено частково; студент невпевнено орієнтується у змісті наукових першоджерел та рекомендованої літератури;
- матеріал викладений не завжди послідовно, висновки не ув'язані між собою;
- не вміє обґрунтовано оцінювати факти та явища, пов'язувати їх з майбутньою професійною діяльністю;
- при викладенні матеріалу, поясненні термінології та вирішенні практичних питань зроблені суттєві помилки.

**Оцінку «незадовільно» (менше 50 балів)** студент отримує, якщо:

- основний зміст завдання не розкрито; студент майже не орієнтується у наукових першоджерелах та рекомендованій літературі; не знає наукових фактів та визначень;
- допущені суттєві помилки у висновках;
- студент слабо володіє спеціальною термінологією;
- наукове мислення та практичні навички майже не сформовані.

## 7. Рекомендована література

### Основна

1. Graham L. Patrick. An Introduction to Medicinal Chemistry. – Oxford University Press, 2013. – 788 p.
2. Sliwoski G., Kothiwale S., Meiler J., Lowe E.W. Jr. Computational Methods in Drug Discovery // Pharmacol Rev. – 2014. – 66. – P. 334-395.
3. Textbook of Drug Design and Discovery, 5th Edition by Kristian Stromgaard, Povl Krosggaard-Larsen, Ulf Madsen, CRC Press. 2016, 436 p. ISBN 10-1498702783
4. Kubinyi H. In Search for New Leads. – EFMC – Yearbook, 2003. – P. 14-28.

### Додаткова

1. Golub A.G., Yakovenko O.Y., Bdzholo V.G., Sapelkin V.M., Zien P., Yarmoluk S.M. Evaluation of 3-Carboxy-4(1H)-quinolones as Inhibitors of Human Protein Kinase CK2 // J Med Chem. – 2006. – 49(22). – P. 6443-6450.
2. Starosyla S.A., Volynets G.P., Bdzholo V.G., Golub A.G., Protopopov M.V., Yarmoluk S.M. ASK1 pharmacophore model derived from diverse classes of inhibitors // Bioorg Med Chem Lett. – 2014. – 24(18). – P. 4418-4423.

### Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. <http://labprice.ua/statti/nauka-i-virobnitstvo/korotko-pro-suchasnu-tehnologiyu-rozrobki-likiv/>
2. <http://labprice.ua/statti/chi-isnuye-v-ukrayini-ratsionalniy-dizayn-novitnya-tehnologiya-rozrobki-likiv/>
3. <http://labprice.ua/statti/nauka-i-virobnitstvo/poshuk-i-validatsiya-molekulyarnih-misheney-pochatkovi-etapi-rozrobki-novih-likiv-chi-provodyatsya-taki-naukovi-doslidzhennya-v-ukrayini/>
4. <http://labprice.ua/statti/ukrayinska-nauka-ta-suspilstvo-zdobutki-problemi-perspektivi/rinok-naukovih-poslug-u-ssha-chi-isnuye-nisha-dlya-ukrayinskih-uchenih-dlya-roboti-u-formati-outsorsingu-naukovih-doslidzen-na-zamovlennya/>
5. <http://labprice.ua/statti/nauka-i-virobnitstvo/v-ukrayini-rozrobki-novih-likiv-ne-potribni-hto-zaperechit/>