

### Тематичний план лекцій

№	Тема лекції	К-сть год	
		Ден. ф-ма навч.	Заочн. ф-ма навч.
<b>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</b>			
1	<p>Основні сучасні стратегії пошуку нових лікарських засобів (від емпіричного до цілеспрямованого пошуку нових лікарських засобів). Використання сучасних технологій у пошуку нових лікарських засобів. Методологія «drug design» (конструювання лікарських засобів). Подвійні-, гібридні-, про-ліки. Органічний синтез - основа створення синтетичних «малих молекул» та напівсинтетичних лікарських засобів. Основні етапи органічного синтезу (окреслення структури цільової молекули, розгляд можливих схем синтезу, підбір продуктів. проведення хімічних реакцій, виділення проміжних і цільових продуктів, їх аналіз та очистка). Поняття про ліганд-, мішень-, структурно-орієнтованого дизайну (ligand- target structure based design). Роль та значення стереохімії у синтезі та створенні лікарських засобів. Використання сучасних підходів в органічному синтезі при створенні лікарських засобів. Ретросинтетичний підхід, багатостадійні методи синтезу, поняття «building-blocks», «privileged structures» тощо у синтетичних підходах. Використання підходів «green-chemistry» (зелена хімія) та розробка «one-pot» (однореакторних) та тандемних «доміно» методів синтезу. Комбінаторна хімія. Синтез «комплексів» біологічно-активна сполук - носій як елементу розробки систем доставки лікарських засобів (drug-delivery systems). Сучасні методи встановлення структури молекул лікарських засобів. Поняття про «сполуки-лідери» (lead-compounds). Методи оптимізації структури сполук лідерів, підхід «from hit to lead» (від сполуки-хіта до сполуки-лідера). Біоізостерна заміна, поняття про біоізостери. Значення параметрів ADME/Tox у формуванні напрямків хімічної модифікації біологічно активних сполук.</p>	2	1
<b>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</b>			
2	<p>Вивчення зв'язку структура-активність як один із інструментів у створенні нових лікарських засобів. Кількісний взаємозв'язок структура - активність (QSAR). Основні принципи побудови та використання прогностичних моделей. Поняття фармакофорної моделі та <i>de novo</i> дизайну. Синтетичні підходи до одержання/модифікації та вивчення залежності структура - активність вуглеводнів поліциклічної будови (стероїдні гормони та структурно споріднені сполуки, тритерпеноїди). Синтетичні підходи до одержання/модифікації та вивчення залежності структура - активність сполук, похідних феніл(гетерил)етиламінів як прикладів біогенних амінів. Аспекти медичної хімії місцевих анестезуючих засобів. Хімічна класифікація групи, взаємозв'язок структура-активність. Вивчення залежності структура - активність засобів, що впливають на серотонінергічну систему.</p>	2	1

3	Використання сульфаніламідного скафолду у синтезі біологічно-активних сполук. Вивчення залежності структура - активність сполук, що вміщують сульфаніламідний фрагмент (протимікробні сульфаніламідни, протизапальні засоби, діуретини тощо). Вивчення закономірностей залежності структура - активність нестероїдних протизапальних лікарських засобів. Хімічна класифікація в межах фармакологічної групи, напрямки оптимізації підходів у створенні нових протизапальних агентів.	2	1
4	Похідні піридину як приклад «привілейованих структур» у синтезі нових лікарських засобів. Вивчення закономірностей залежності структура - активність похідних піридину та споріднених гетероциклічних систем. Вивчення закономірностей залежності структура - активність похідних барбітурової кислоти як лікарських засобів та біологічно активних сполук на різних етапах дослідження. Синтетичні підходи до отримання барбітуратів.	2	0,5
5	Вивчення закономірностей залежності структура - активність похідних пурину як лікарських засобів та біологічно активних сполук на різних етапах дослідження. Синтетичні підходи до отримання та модифікації ксантинів та споріднених гетероциклічних сполук. Вивчення закономірностей залежності структура - активність β-лактамних антибіотиків. Синтетичні підходи до отримання та модифікації β-лактамідів. Поняття про penicillin-binding protein.	2	0,5
<b>ВСЬОГО</b>		<b>10</b>	<b>4</b>

### Тематичний план практичних занять

№	Тема занять	К-сть годин	
		Ден. ф-ма навч.	Заочн. ф-ма навч.
<b>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</b>			
1	Реалізація основних етапів органічного синтезу: окреслення структури цільової молекули, розгляд можливих схем синтезу, підбір продуктів, проведення хімічних реакцій, виділення проміжних і цільових продуктів, їх аналіз та очистку. Однореакторні приклади синтезу поліфункціональних похідних на основі 4-тіазолідинону. Способи покращення ADME/Tox параметрів біологічно-активних сполук: модифікації по гідрокси-, меркаптогрупах; карбокси-, карбалкокси і карбонільних групах; аміногрупі.	4	1
2	Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на основі біоізостерної заміни. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH <sub>2</sub> , CH <sub>3</sub> , OH-групи, S, NH, CH <sub>2</sub> O-лінкери.	4	1

	Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліків. Захисні групи в органічному синтезі.		
<b>Разом</b>		<b>8</b>	<b>2</b>
<b>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</b>			
3	Побудова та аналіз прогностичних рівнянь кількісної залежності структура-активність (QSAR-аналіз). Розрахунок молекулярних дескрипторів. Стероїдні гормони та структурно спорідненні сполуки, тритерпеноїди, методи одержання/модифікації взаємозв'язок структура-активність.	4	0,5
4	Похідні феніл(гетерил)етиламінів, як біогенні аміни та лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Місцево-анестезуючі агенти, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Встановлення фармакофорного угруповання.	4	0,5
5	Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Сульфаніламідни, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	4	1
6	Нестероїдні протизапальні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Пошук спільних та відмінних ознак в межах хімічних суб-класів.	2	
7	Піридиновий цикл як приклад «прилевіюваних структур», методи синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.	2	
8	Похідні піримідину (барбітурати) як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	2	
9	Похідні пурину як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	2	
10	$\beta$ -Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	2	
<b>Разом</b>		<b>22</b>	<b>2</b>
<b>Кількість годин практичних занять з дисципліни</b>		<b>30</b>	<b>4</b>

#### Тематичний план самостійної роботи

№	Тема самостійної роботи	К-сть годин		Вид контролю
		Ден. ф-ма навч.	Заочн. ф-ма навч.	
<b>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</b>				
1	Реалізація основних етапів органічного синтезу: окреслення структури цільової молекули, розгляд можливих схем синтезу, підбір продуктів, проведення хімічних реакцій, виділення проміжних і цільових продуктів, їх аналіз та очистку. Однореакторні приклади синтезу поліфункціональних похідних на основі 4-тіазолідинону.	2	6	Поточний контроль на практичних заняттях / е-звіти

2	Способи покращення ADME/Tox параметрів біологічно-активних сполук: модифікації по гідрокси-, меркаптогрупам; карбокси-, карбалкокси і карбонільних групах; аміногрупі.	2	6	
3	Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на основі біоізостерної заміни. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH <sub>2</sub> , CH <sub>3</sub> , OH-групи, S, NH, CH <sub>2</sub> O-лінкери.	2	6	
4	Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліків. Захисні групи в оргнічному синтезі.	2	6	
<b>Разом</b>		<b>8</b>	<b>24</b>	
<b>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</b>				
5	Побудова та аналіз прогностичних рівнянь кількісної залежності структура-активність (QSAR-аналіз). Розрахунок молекулярних дескрипторів.	2	3	
6	Стероїдні гормони та структурно спорідненні сполуки, тритерпеноїди, методи одержання/модифікації взаємозв'язок структура-активність.	3	5	
7	Похідні феніл(гетерил)етиламінів, як біогенні аміни та лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	3	5	
8	Місцево-анестезуючі агенти, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Встановлення фармакофорного угруповання.	3	5	
9	Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність	3	4	
10	Сульфаніламиди, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	3	6	Поточний контроль на практичних заняттях / е-звіти
11	Нестероїдні протизапальні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Пошук спільних та відмінних ознак в межах хімічних суб-класів.	5	6	
12	Піридиновий цикл як приклад «прилевіюваних структур», методи синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.	5	6	
13	Похідні піримідину (барбітурати) як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	5	6	
14	Похідні пурину як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	5	6	
15	β-Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	5	6	
<b>Разом</b>		<b>42</b>	<b>58</b>	
<b>Разом СРС з дисципліни</b>		<b>50</b>	<b>82</b>	