

ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ДАНИЛА ГАЛИЦЬКОГО

Кафедра фармацевтичної, органічної і біоорганічної хімії



ЗАТВЕРДЖУЮ

Перший проректор
з науково-педагогічної роботи
доц. І.І. Солонинко

2023 р.

НАВЧАЛЬНА ПРОГРАМА

вибіркової дисципліни

ВБ 1.37

**ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ СИНТЕЗУ І ЗВ'ЯЗОК МІЖ
СТРУКТУРОЮ І ДІЄЮ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ**

підготовки фахівців другого (магістерського) рівня вищої освіти

галузі знань 22 «Охорона здоров'я»

за спеціальністю 226 «Фармація, промислова фармація»

спеціалізація 226.01 «Фармація»

для студентів IV курсу фармацевтичного факультету

денної та заочної форми навчання

Обговорено та ухвалено
на методичному засіданні кафедри
фармацевтичної, органічної і
біоорганічної хімії
Протокол № 11
від "26" червня 2023 р.

Завідувач кафедри
А. Лесик проф. Лесик Р.Б.

Затверджено
профільною методичною комісією
з хімічних та фармацевтичних
дисциплін
Протокол № 3
від "27" червня 2023 р.

Голова профільної методичної комісії
С. Білоус доц. Білоус С.Б.

Навчальна програма дисципліни за вибором Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів для студентів 4 курсу фармацевтичного факультету, які навчаються за спеціальністю 226 «Фармація, промислова фармація» складена проф. Лесик Р.Б., доц. Камінський Д.В., доц. Горішній В.Я., ст. викл. Новікевич О.Т.

(вказати авторів, їхні посади, наукові ступені та вчені звання)

Зміни та доповнення до програми навчальної дисципліни

№ з/п	Зміст внесених змін (доповнень)	Дата і № протоколу засідання кафедри	Примітки
	Немає		

ВСТУП

Програма вивчення вибіркової дисципліни «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів»

складена згідно з вимогами проекту Стандарту вищої освіти України другого (магістерського) рівня галузі знань 22 «Охорона здоров'я» спеціальності 226 «Фармація, промислова фармація», спеціалізація 226.01 «Фармація», освітньої програми *магістра* фармації, примірної навчальної програми з дисципліни «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів»

Опис навчальної дисципліни (анотація)

На сьогодні підхід до пошуку нових лікарських засобів зазнав докорінних змін та може бути охарактеризованим як перехід від емпіричного до цілеспрямованого створення (дизайну) високоактивних молекул. Це зумовлено використанням досягнень біотехнології, молекулярної біології, експериментальної фармакології тощо, що відображено у впровадженні ряду новітніх технологій, узагальнених у так званому підході «drug design» (конструювання ліків), що включає віртуальний та високоефективний скринінг, молекулярний докінг, QSAR-аналіз, комбінаторну хімію тощо. В такому контексті зазнали зміни підходи і методи органічного синтезу, який залишається головним інструментом створення лікарських засобів, адже більш ніж 80% існуючих лікарських засобів відносяться до так званих малих синтетичних молекул. Для формування сучасного фахівця, ознайомлення з новими методами та підходами органічного синтезу («зелена хімія», комбінаторна хімія та ін.) є актуальним та необхідним завданням.

З іншого боку невід'ємним завданням для розуміння сучасних підходів та методів створення нових лікарських засобів є вивчення взаємозв'язку структура – активність. Розуміння хімічного підґрунтя різноманітності та спорідненості фармакологічних ефектів лікарських засобів та біологічно активних сполук дозволяє майбутньому спеціалісту не тільки глибше розуміти аспекти реалізації фармакологічної активності а й формувати можливі напрямки модифікації

молекулярної структури потенційних лікарських засобів з використанням методів органічного синтезу.

Таким чином, знання теоретичних основ органічного синтезу – як основного інструменту створення лікарських засобів та розуміння підходів оцінки та інтерпретації взаємозалежності структура – біологічна активність, є необхідною передумовою підготовки висококваліфікованого спеціаліста з вищою фармацевтичною освітою.

Програма з курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів» для студентів IV курсу фармацевтичного факультету складена у відповідності з освітньо-кваліфікаційними характеристиками (ОКХ) і освітньо-професійними програмами (ОПП) підготовки фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня «спеціаліст», затвердженими наказом МОН України від 16.04.03 № 239, експериментальним навчальним планом розробленим на принципах Європейської кредитно-трансферної системи (ECTS).

Видами навчальних занять згідно з навчальним планом є: а) лекції; б) практичні заняття; в) самостійна робота студентів; г) консультації.

Засвоєння теми (поточний контроль) контролюють на практичних заняттях відповідно до конкретних цілей; засвоєння змістових модулів (проміжний контроль) – на практичних заняттях із застосуванням теоретичних питань, комп'ютерних тестів, розв'язування ситуаційних задач, здачі практичних навиків.

Підсумковий контроль здійснюють на підсумковому контрольному занятті. Оцінка успішності студента з вибіркової дисципліни є рейтинговою і виставляється за багатобальною шкалою з урахуванням результатів семестрового контролю та атестації студентів.

Опис навчального плану вибіркової дисципліни «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів» для студентів фармацевтичного факультету за спеціальністю «Фармація»

Структура курсу за вибором	Кількість кредитів, годин, з них				Рік навчання семестр	Вид контролю
	Всього	Аудиторних		СРС		
		Лекцій	Практичних занять			
Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів	3,0 кредитів ECTS / 90 год.	10	30	50	4 курс (VII семестр)	залік
Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів <i>Заочна форма</i>	3,0 кредитів ECTS / 90 год.	4	4	82	4 курс (VII семестр)	залік

Предметом вивчення навчальної дисципліни є

хімічна будова лікарських засобів, їх фізичні та хімічні властивості; взаємозв'язок між хімічною будовою та дією на організм, методи контролю якості та змін, що відбуваються при зберіганні та метаболізмі, а також методи отримання та очистки лікарських засобів, біологічно активних сполук та їх метаболітів.

Міждисциплінарні зв'язки: загальна та неорганічна хімія, органічна та біоорганічна хімія, аналітична хімія, біофізика, біологія, біологічна хімія, нормальна фізіологія, патологічна фізіологія, фармакологія, токсикологічна хімія, фармакогнозія, технологія ліків, клінічна фармація, стандартизація лікарських засобів.

2. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ ВИБІРКОВОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Метою вивчення курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів» є ознайомлення майбутніх спеціалістів з сучасними підходами до створення лікарських засобів та біологічно активних сполук; засвоєння синтетичних підходів для отримання і модифікації органічних молекул як лікарських засобів та біологічно активних сполук; ознайомлення та засвоєння підходів до аналізу взаємозв'язку структура активність в межах певної групи.

Суть викладання курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів» для використання у майбутній практичній діяльності та його основні **завдання** полягають у

- ознайомленні і засвоєнні основних підходів до створення лікарських засобів
- ознайомленні і засвоєнні основних прийомів та підходів органічного синтезу при створенні нових лікарських засобів та модифікації активних молекул
- вмінні аналізувати залежності структура активність в межах певної групи сполук.
 - *Компетентності та результати навчання, формуванню яких сприяє дисципліна (взаємозв'язок з нормативним змістом підготовки здобувачів вищої освіти, сформульованим у термінах результатів навчання у Стандарті вищої освіти).*

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти дисципліна забезпечує набуття студентами **компетентностей**:

- загальні: ЗК2; ЗК6; ЗК11; ЗК12.

- фахові: ФК 4; ФК 7; ФК 12; ФК 19; ФК 20

Деталізація компетентностей відповідно до дескрипторів НРК у формі «Матриці компетентностей».

Матриця компетентностей

№	Компетентність	Знання	Уміння	Комунікація	Автономія та
---	----------------	--------	--------	-------------	--------------

					відповідальність
1	ЗК 2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях	Знати методи реалізації знань у вирішенні практичних питань	Вміти використовувати фахові знання для вирішення практичних ситуацій	Встановлювати зв'язки із суб'єктами практичної діяльності	Нести відповідальність за своєчасність прийнятих рішень
2	ЗК 6. Знання та розуміння предметної області та розуміння професії.	Знати структуру та особливості професійної діяльності	Вміти здійснювати професійну діяльність, що потребує оновлення та інтеграції знань	Формувати комунікаційну стратегію у професійній діяльності	Нести відповідальність за професійний розвиток з високим рівнем автономності
3	ЗК 11. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.	Знати методи оцінювання показників якості діяльності	Вміти забезпечувати якісне виконання професійної роботи	Встановлювати зв'язки для забезпечення якісного виконання робіт	Нести відповідальність за якісне виконання робіт
4	ЗК 12. Здатність проведення досліджень на відповідному рівні	Знати компоненти системи охорони здоров'я, планування та оцінку наукового дослідження	Здійснювати пошук наукових джерел інформації; здійснювати вибір методик проведення наукового дослідження; використовувати методи математичного аналізу і моделювання, теоретичного і експериментального дослідження у фармації.	Використовувати інформаційні дані з наукових джерел	Нести відповідальність за розробку та реалізацію запланованих проектів
5	ФК 4. Здатність забезпечувати раціональне застосування рецептурних та безрецептурних лікарських засобів та інших товарів аптечного асортименту згідно з фізико-хімічними, фармакологічними характеристиками, біохімічними, патофізіологічними особливостями конкретного захворювання та	Знати: хімічну будову лікарських засобів; основні групи біологічно активних речовин лікарської рослинної сировини; зв'язок "хімічна будова – фармакологічна дія"; механізм дії, фармакологічні ефекти, показання до застосування ліків; характерні ознаки певних фармакологічних та фармакотерапевтичних груп; клініко-біофармацевтичні особливості різних лікарських форм; нові лікарські форми	Проводити порівняльну характеристику лікарських засобів з урахуванням хімічної будови, механізму дії та фармакологічних властивостей з метою визначення переваг та недоліків окремих препаратів надавати порівняльну характеристику оригінальним (інноваційним) лікарським засобам (брендам) та їх копіям – генеричним лікам, керуючись даними клініко-фармакологічних досліджень,	Отримувати необхідну інформацію з визначених джерел для забезпечення умов надання якісної та безпечної фармацевтичної допомоги	Нести відповідальність за обґрунтованість управлінських рішень щодо поліпшення якості фармацевтичної допомоги

<p>фармакотерапевтичними схемами його лікування</p>	<p>продовженої дії. Терапевтичні системи доставки лікарських засобів; характеристика видів дії та шляхів введення лікарських препаратів; вплив ендогенних чинників (генетичні, вікові та статеві анатомо-фізіологічні особливості людини, захворювань окремих органів і систем) на фармакокінетику та фармакодинаміку (фармакологічні та токсикологічні властивості) ліків; основи фармакогенетики. Роль спадкової (генетичної) патології в механізмах індивідуальної переносимості ліків; основи хронофармакології. Вплив природних та циркадних ритмів людини на терапевтичну ефективність ліків; взаємодію лікарських речовин та їжі на етапах всмоктування, метаболізму та виведення; поняття про біоеквівалентність лікарських препаратів та принципи їх клінічного вивчення; поняття про оригінальні (інноваційні) препарати та генерики. Вимоги, що ставляться до генеричних лікарських засобів; сучасні схеми та напрямки фармакотерапії найбільш поширених</p>	<p>фармакоеконімічних показників та інформаційною базою даних про лікарські засоби для обґрунтування оптимального вибору лікарського препарату; визначати переваги та недоліки тієї чи іншої лікарської форми конкретних лікарських препаратів різних фармакологічних груп з урахуванням біофармацевтичних, фармакокінетичних та фармакологічних особливостей лікарського засобу, а також анатомо-фізіологічних особливостей хворого (вік, стать, фізичний стан та ін.); визначати вплив факторів, які залежать від стану і особливостей організму людини (фізіологічні, патологічні тощо) на процеси всмоктування, розподілу, депонування, метаболізму та виведення лікарського засобу, ґрунтуючись на результатах опитування та анамнезі хворого; на основі анатомо-фізіологічних особливостей людини, фармакологічних властивостей лікарських препаратів та лікарських форм визначати оптимальний режим введення ліків (час, кратність, тривалість); визначати можливий вплив їжі на фармакокінетичні та фармакологічні властивості лікарських</p>		
---	---	---	--	--

		<p>хвороб; явища, що виникають при повторному та тривалому прийомі лікарських засобів; фармакологічні групи лікарських засобів, які можуть викликати лікарську залежність та механізми її розвитку; основні конституціональні типи людини та їх аномалії; особливості функціонування органів та систем при типових патологічних процесах; клінічні прояви (симптоми та синдроми) захворювань, за якими призначаються лікарські засоби; біохімічний склад їжі; біохімію ферментів.</p>	<p>засобів (час та кількість всмоктування, тривалість дії, шлях виведення, можливість прояву небажаної дії та ін.) для підвищення ефективності та зменшення побічних ефектів; на основі фармакологічних і токсикологічних властивостей лікарських засобів визначати можливі негативні ефекти ліків (прояви алергії, гематотоксична і гепатотоксична дія, виникнення звикання та пристрасті тощо) для проведення заходів щодо їх запобігання.</p>		
6	<p>ФК 7. Здатність забезпечувати належне зберігання лікарських засобів та інших товарів аптечного асортименту відповідно до їх фізико-хімічних властивостей та правил Належної практики зберігання (GSP) у закладах охорони здоров'я</p>	<p>Знати: класифікацію лікарських засобів та лікарських форм; накази МОЗ України щодо отримання, зберігання та видачі отруйних, наркотичних і прирівняних до них лікарських засобів; фізико-хімічні властивості лікарських речовин. Види тари, закупорювальних засобів і пакувальних матеріалів, які використовуються у медицині та фармації; накази МОЗ України про організацію зберігання в аптечних закладах різних груп лікарських засобів та виробів медичного призначення;</p>	<p>Забезпечувати відповідні умови зберігання отруйних, наркотичних та прирівняних до них лікарських засобів, а також лікарських форм з ними; забезпечувати умови для запобігання небажаних наслідків, враховуючи можливий вплив умов зберігання на якість товарів аптечного асортименту, лікарської рослинної сировини та виробів медичного призначення; контролювати умови зберігання сировини та матеріалів на підприємствах фармацевтичного профілю; визначати стабільність</p>	<p>Проводити постійний моніторинг належного зберігання лікарських засобів та виробів медичного призначення на підприємствах фармацевтичного профілю</p>	<p>Нести відповідальність за зберігання лікарських засобів та виробів медичного призначення відповідно до Належної практики зберігання (GSP) у закладах охорони здоров'я</p>

		правила зберігання лікарських речовин з різними фізико-хімічними властивостями; фармакологічні властивості лікарських засобів; стабільність та терміни зберігання лікарських засобів.	лікарських засобів та виробів медичного призначення при зберіганні протягом встановлених строків придатності; перевіряти ліки, у яких скінчився строк придатності на можливість подовження строку їх подальшого застосування у медичній практиці, оформляти відповідний паспорт якості.		
7	ФК 12. Здатність використовувати у професійній діяльності знання нормативно-правових, законодавчих актів України та рекомендацій належних фармацевтичних практик.	Знати: - основи системи права і фармацевтичного законодавства; - основні механізми державного регулювання фармацевтичної діяльності; - принципи організації надання фармацевтичної допомоги населенню; - основні принципи організації фармацевтичного забезпечення населення; - правові та етичні норми фармацевтичної діяльності	- Користуватись нормативно-правовими актами, що регламентують фармацевтичну діяльність в Україні та за кордоном; - відстежувати та визначати зміни і доповнення у вітчизняному фармацевтичному законодавстві; - складати відомості про матеріально-технічну базу аптеки та аптечного пункту, а також організаційні документи, необхідні для їх діяльності; - формувати відносини з хворими та лікарями з метою виконання етичних критеріїв ВООЗ та принципів належної аптечної практики щодо просування лікарських засобів на ринку, мінімізації зловживання та невірному використанні лікарських засобів	Формувати висновки та фахово застосовувати закони та нормативні документи	Нести відповідальність за якісне та своєчасне використання нормативних документів у професійній діяльності
8	ФК 19. Здатність організувати та здійснювати контроль якості лікарських засобів у відповідності з вимогами	Знати: - державне нормування якості лікарських засобів; - кінетику хімічних реакцій та каталіз; - швидкість хімічних реакцій та хімічну рівновагу;	- визначати наявність сторонніх речовин (домішок) у сировині, матеріалах та готовій продукції; - визначати основні фізичні характеристики лікарських речовин	Здійснювати контроль якості лікарських засобів та їх сертифікацію	Нести відповідальність за проведення сертифікації та запобігання розповсюдженню

<p>Державної фармакопеї України та належних практик, визначати способи відбору проб для контролю лікарських засобів та проводити їх стандартизацію відповідно до діючих вимог, запобігати розповсюдженню фальсифікованих лікарських засобів</p>	<p>- фізико-хімічні властивості лікарських речовин; - методи якісного та кількісного аналізу лікарських речовин; - аналіз лікарських форм у процесі виробництва; - випробування на чистоту лікарських засобів; - потенціометричний аналіз; - показники якості парентеральних, твердих, м'яких та аерозольних лікарських форм, - стабільність та терміни зберігання лікарських засобів; - аналіз води очищеної, високо очищеної та води ін'єкції; - очищення, переробка та захоронення відходів виробництва</p>	<p>(температуру топлення, температуру кипіння і температуру застигання) фізичними методами; - визначати основні показники готових лікарських засобів отриманих з лікарських та допоміжних речовин, візуальними та інструментальними методами: прозорість; забарвленість; рН; показник заломлення; кут обертання та густину ін'єкційних розчинів, - проводити контроль води очищеної, для ін'єкцій, отриманої з питної води, хімічними та інструментальними методами, а також інших розчинників; - визначати концентрацію спирту у водно-спиртових розчинах, користуючись різними розрахунковими методами, приладами; - відбирати проби та зразки лікарських речовин, лікарської рослинної сировини, допоміжних матеріалів, напівфабрикатів для аналізу у тому числі на апірогенність та бактеріологічний аналіз; - оформляти відповідний паспорт якості, здійснювати вибіркового посерійний контроль готової продукції на відповідність її якості аналітичній документації з метою запобігання браку; - визначати стабільність лікарських засобів та виробів медичного призначення при зберіганні протягом встановлених строків придатності.</p>	<p>фальсифікованих лікарських засобів</p>
---	--	--	---

9	<p>ФК 20. Здатність здійснювати розробку методик контролю якості лікарських засобів, у тому числі активних фармацевтичних інгредієнтів, лікарської рослинної сировини і допоміжних речовин з використанням фізичних, хімічних, фізико-хімічних, біологічних, мікробіологічних, фармакотехнологічних та фармакоорганолептичних методів контролю</p>	<p>Знати: - якісний аналіз катіонів та аніонів; - лікарські засоби неорганічної природи; - елементний аналіз та аналіз за функціональними групами; - функціональний аналіз органічних сполук за функціональними групами; - загальні методи аналізу неорганічних та органічних лікарських сполук; - хімічні титриметричні методи аналізу; - хроматографічні методи ідентифікації, дослідження чистоти та кількісного вмісту лікарських засобів; - оптична активність і питоме обертання; - гравіметричний метод аналізу; - функціональний аналіз органічних сполук; - основні поняття титриметричного аналізу; - спектральні методи аналізу</p>	<p>- визначати катіони і аніони діючих речовин неорганічної природи у сировині, матеріалах, напівпродуктах та готовій продукції хімічними методами; - визначати функціональні групи діючих речовин органічної природи у сировині, матеріалах, напівпродуктах, готовій продукції; - готувати титровані, робочі розчини і розчини індикаторів з хімічних реактивів та встановлювати процентну концентрацію і молярність титриметричними та фізико-хімічними методами; -</p>	<p>Розробляти методики контролю якості фармацевтичної продукції</p>	<p>Нести відповідальність за валідність розроблених методик контролю якості</p>
---	---	--	---	---	---

Результати навчання:

Інтегративні кінцеві програмні результати навчання, формуванню яких сприяє навчальна дисципліна:

ПРН 1 Проводити професійну діяльність у соціальній взаємодії оснований на гуманістичних і етичних засадах; ідентифікувати майбутню професійну діяльність як соціально значущу для здоров'я людини.

ПРН 2 Застосовувати знання з загальних та фахових дисциплін у професійній діяльності.

ПРН 3 Дотримуватись норм санітарно-гігієнічного режиму та вимог техніки безпеки при здійсненні професійної діяльності.

ПРН 4 Демонстрування вміння самостійного пошуку, аналізу та синтезу інформації з різних джерел та використання цих результатів для рішення типових та складних спеціалізованих завдань професійної діяльності.

ПРН 6 Аргументувати інформацію для прийняття рішень, нести відповідальність за них у стандартних і нестандартних професійних ситуаціях; дотримуватися принципів деонтології та етики у професійній діяльності.

ПРН 7 Виконувати професійну діяльність з використанням креативних методів та підходів.

ПРН 8 Здійснювати професійне спілкування державною мовою, використовувати навички усної комунікації іноземною мовою, аналізуючи тексти фахової спрямованості та перекладати іншомовні інформаційні джерела.

ПРН 9 Здійснювати професійну діяльність використовуючи інформаційні технології, «Інформаційні бази даних», системи навігації, Internet-ресурси, програмні засоби та інші інформаційно-комунікаційні технології.

ПРН 12 Аналізувати інформацію, отриману в результаті наукових досліджень, узагальнювати, систематизувати й використовувати її у професійній діяльності

ПРН 14 Визначати переваги та недоліки лікарських засобів різних фармакологічних груп з урахуванням їхніх хімічних, фізико-хімічних, біофармацевтичних, фармакокінетичних та фармакодинамічних особливостей. Рекомендувати споживачам безрецептурні лікарські засоби та інші товари аптечного асортименту з наданням консультативної допомоги та фармацевтичної опіки .

ПРН 16 Визначати вплив факторів, що впливають на процеси всмоктування, розподілу, депонування, метаболізму та виведення лікарського засобу і обумовлені станом, особливостями організму людини та фізико-хімічними властивостями лікарських засобів.

ПРН 19. Прогнозувати та визначати вплив факторів навколишнього середовища на якість лікарських засобів та споживчі характеристики інших товарів аптечного асортименту під час їх зберігання.

ПРН 20 Здійснювати комплекс організаційно-управлінських заходів щодо забезпечення населення та закладів охорони здоров'я лікарськими засобами та іншими товарами аптечного асортименту. Здійснювати усі види обліку в аптечних закладах, адміністративне діловодство, процеси товарознавчого аналізу.

ПРН 24 Планувати та реалізовувати професійну діяльність на основі нормативно-правових актів України та рекомендацій належних фармацевтичних практик.

ПРН 30 Забезпечувати контроль якості лікарських засобів та документувати його результати. Здійснювати управління ризиками якості на усіх етапах життєвого циклу лікарських засобів.

ПРН 31 Здійснювати усі види контролю якості лікарських засобів; складати сертифікати якості серії лікарського засобу та сертифікату аналізу враховуючи вимоги чинних нормативних документів, Державної фармакопеї України та результати проведеного контролю якості. Розробляти специфікації та методики контролю якості відповідно до вимог чинної Державної фармакопеї.

ПРН 32 Визначати основні органолептичні, фізичні, хімічні, фізико-хімічні, та фармакотехнологічні показники лікарських засобів, обґрунтовувати та обирати методи їх стандартизації, здійснювати статистичну обробку результатів згідно з вимогами Державної фармакопеї України.

Результати навчання для дисципліни:

знати:

- хімічну та фармакологічну класифікацію лікарських засобів;
- міжнародні непатентовані назви лікарських субстанцій та препарати, до складу яких вони входять
- основні закономірності зв'язку «структура-активність», підходи до адекватної заміни лікарських препаратів
- основні шляхи метаболізму лікарських засобів, оптимальні умови дії проліків
- найбільш поширені небезпеки хімічної взаємодії лікарських засобів між собою та з продуктами харчування, що можуть погіршити біодоступність, безпечність та ефективність
- хімічні основи раціонального застосування лікарських препаратів
- методи якісного і кількісного аналізу лікарських засобів
якісний аналіз катіонів та аніонів; - елементний аналіз та аналіз за функціональними групами; - функціональний аналіз органічних сполук за функціональними групами; - хімічні титриметричні методи аналізу; - хроматографічні методи ідентифікації, гравіметричний метод аналізу; - спектральні методи аналізу тощо);
- методи дослідження чистоти;

вміти:

- Визначати належність лікарського засобу до фармакологічної групи з урахуванням хімічної будови, здійснювати рекомендації щодо можливої заміни лікарського препарату усередині фармакологічної групи
- надавати кваліфіковану фармацевтичну опіку пацієнтам з урахуванням фізичних, фізико-хімічних та хімічних властивостей лікарських засобів;
- визначати можливу взаємодію лікарських препаратів при їх сумісному застосуванні та надавати рекомендації щодо її унеможливлення
- надавати інформацію пацієнтові щодо можливого небажаного впливу на дію лікарського засобу продуктів харчування.
- Визначати оптимальні умови для зберігання лікарських засобів.
- Надавати рекомендації фармацевтові при виготовленні лікарських засобів щодо можливої хімічної несумісності та шляхів її уникнення
- користуватися аналітичною документацією, яка регламентує якість лікарських засобів (Державна фармакопея, Міжнародна фармакопея, національні та регіональні фармакопеї, АНД, відповідні накази та інструкції);
- користуватися галузевими стандартами, методичними вказівками при здійсненні методів контролю якості субстанцій та лікарських препаратів;
- використовувати хімічні, фізичні, фізико-хімічні методи при контролі якості лікарських засобів;
- давати кваліфіковану оцінку якості лікарських засобів згідно з результатами аналізу.

- Інформаційний обсяг навчальної дисципліни

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 3,0 кредитів ЄКТС, 90 годин.

4. СТРУКТУРА КУРСУ ЗА ВИБОРОМ

№ п/п	Тема	Лекції	Практичні заняття	СРС	Індивідуальна робота
Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул					
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.	0,5	0,5	2	
2	Способи покращення ADME/Tox параметрів біологічно-активних сполук: модифікації по гідрокси-, меркаптогрупах; карбокси-, карбалкокси і карбонільних групах; аміногрупі.	0,5	0,5	2	
3	Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на основі біозостерної заміни. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH ₂ , CH ₃ , OH-групи, S, NH, CH ₂ O-лінкери.	0,5	0,5	2	
4	Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліквів. Захисні групи в органічному синтезі.	0,5	0,5	2	
Разом за змістовим модулем 1		2	2	8	
Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design					
5	Побудова та аналіз прогностичних рівнянь кількісної залежності структура-активність (QSAR-аналіз). Розрахунок молекулярних дескрипторів.	1	1	2	
6	Стероїдні гормони та структурно спорідненні сполуки, тритерпеноїди, методи одержання/модифікації взаємозв'язок структура-активність.	1	2	3	
7	Похідні феніл(гетерил)етиламінів, як біогенні аміни та лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	1	2	3	
8	Місцево-анестезуючі агенти, методи синтезу/модифікації.	1	2	3	

	Взаємозв'язок структура-активність. Встановлення фармакофорного угруповання.				
9	Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	2	3	3	
10	Сульфаніламиди, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	2	3	3	
11	Нестероїдні протизапальні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Пошук спільних та відмінних ознак в межах хімічних субкласів.	-	3	5	
12	Піридиновий цикл як приклад «прилевіюваних структур», методи синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.	-	3	5	
13	Похідні піримідину (барбітурати) як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	-	3	5	
14	Похідні пурину як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	-	3	5	
15	β -Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	-	3	5	
Разом					
Усього годин 90 / 3,0 кредитів ECTS		10	30	50	
Підсумковий контроль					Залік

Заочна форма навчання

№ п/п	Тема	Лекції	Практичні заняття	СРС	Індивідуальна робота
Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул					
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.	1	1	6	
2	Способи покращення ADME/Tox параметрів біологічно-активних сполук: модифікації по гідрокси-, меркаптогрупах; карбокси-, карбалкокси і карбонільних групах; аміногрупі.	-		6	
3	Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на			6	

	основі біозостерної заміни. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH ₂ , CH ₃ , OH-групи, S, NH, CH ₂ O-лінкери.				
4	Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліків. Захисні групи в органічному синтезі.	1	1	6	
Разом за змістовим модулем 1		2	2	24	
Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design					
5	Побудова та аналіз прогностичних рівнянь кількісної залежності структура-активність (QSAR-аналіз). Розрахунок молекулярних дескрипторів.	-		5	
6	Стероїдні гормони та структурно спорідненні сполуки, тритерпеноїди, методи одержання/модифікації взаємозв'язок структура-активність.	-		5	
7	Похідні феніл(гетерил)етиламінів, як біогенні аміни та лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	-	1	5	
8	Місцево-анестезуючі агенти, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Встановлення фармакофорного угруповання.	-		4	
9	Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	1		3	
10	Сульфаніламід, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	1		6	
11	Нестероїдні протизапальні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Пошук спільних та відмінних ознак в межах хімічних суб-класів.	-		6	
12	Піридиновий цикл як приклад «прилевіюваних структур», методи синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.	-		6	
13	Похідні піримідину (барбітурати) як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	-	1	6	
14	Похідні пурину як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	-		6	
15	β-Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	-		6	
Разом		4	4	58	
Усього годин 90 / 3,0 кредитів ECTS		4	4	82	
Підсумковий контроль					Залік

5. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ

з курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів»

№ п/п	Тема лекції	Кількість годин
	<i>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</i>	
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
	РАЗОМ	2
	<i>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</i>	
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 місцево-анестезуючих засобів. Хімічна класифікація групи, взаємозв'язок структура-активність. Вивчення</p>	2

	залежності структура - активність засобів, що впливають на серотонінергічну систему.	
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
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
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
	РАЗОМ	10
	<i>Кількість лекційних годин</i>	10

Заочна форма навчання

№ п/п	Тема лекції	Кількість годин
	<i>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</i>	
1	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	1

	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.	
	РАЗОМ	1
	<i>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</i>	
2	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 місцево-анестезуючих засобів. Хімічна класифікація групи, взаємозв'язок структура-активність. Вивчення залежності структура - активність засобів, що впливають на серотонінергічну систему.	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.	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.	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-	0,5

	лактамідів. Поняття про penicillin-binding protein.	
	РАЗОМ	4
	<i>Кількість лекційних годин</i>	4

5. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ

з курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів»

№ п/п	Тема практичного заняття	Кількість годин
	<i>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</i>	
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
2	Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на основі біоізостерної заміни. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH ₂ , CH ₃ , OH-групи, S, NH, CH ₂ O-лінкери. Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліків. Захисні групи в органічному синтезі.	4
	РАЗОМ	8
	<i>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</i>	
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
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
5	Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Сульфаніламідні, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	4
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	2

	синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.	
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	β -Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	2
	РАЗОМ	30
	<i>Кількість годин практичних занять</i>	30

№ п/п	Тема практичного заняття	Кількість годин
	<i>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</i>	
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.	1
2	Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на основі біоізостерної заміни. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH ₂ , CH ₃ , OH-групи, S, NH, CH ₂ O-лінкери. Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліків. Захисні групи в органічному синтезі.	1
	РАЗОМ	2
	<i>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</i>	
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.	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	0,5

	структура-активність. Встановлення фармакофорного угруповання.	
5	<p>Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Сульфаніламід, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.</p> <p>Нестероїдні протизапальні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Пошук спільних та відмінних ознак в межах хімічних суб-класів.</p> <p>Піридиновий цикл як приклад «прилевіюваних структур», методи синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.</p> <p>Похідні піримідину (барбітурати) як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.</p> <p>Похідні пурину як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.</p> <p>β-Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.</p>	1
	РАЗОМ	4
	<i>Кількість годин практичних занять</i>	4

6. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ

з курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів»

№ п/п	Тема самостійної роботи	Кількість годин
	<i>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</i>	
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
2	Способи покращення ADME/Tox параметрів біологічно-активних сполук: модифікації по гідрокси-, меркаптогрупах; карбокси-, карбалкокси і карбонільних групах; аміногрупі.	2
3	Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на основі біоізостерної заміни. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH ₂ , CH ₃ , OH-групи, S, NH, CH ₂ O-лінкери.	2
4	Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліків. Захисні групи в органічному синтезі.	2
	РАЗОМ	8
	<i>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</i>	
5	Побудова та аналіз прогностичних рівнянь кількісної залежності структура-активність (QSAR-аналіз). Розрахунок молекулярних дескрипторів.	2
6	Стероїдні гормони та структурно спорідненні сполуки, тритерпеноїди, методи одержання/модифікації взаємозв'язок структура-активність.	3
7	Похідні феніл(гетерил)етиламінів, як біогенні аміни та лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	3
8	Місцево-анестезуючі агенти, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Встановлення фармакофорного угруповання.	3
9	Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	3
10	Сульфаніламідні, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	3

11	Нестероїдні протизапальні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Пошук спільних та відмінних ознак в межах хімічних суб-класів.	5
12	Піридиновий цикл як приклад «прилевіюваних структур», методи синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.	5
13	Похідні піримідину (барбітурати) як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	5
14	Похідні пурину як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	5
15	β -Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	5
	РАЗОМ	42
	<i>Кількість годин самостійної роботи</i>	50

Заочна форма

№ п/п	Тема самостійної роботи	Кількість годин
	<i>Змістовий модуль 1. Органічний синтез – основа створення нових лікарських засобів. Методи хімічної модифікації та оптимізації органічних молекул</i>	
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.	6
2	Способи покращення ADME/Tox параметрів біологічно-активних сполук: модифікації по гідрокси-, меркаптогрупах; карбокси-, карбалкокси і карбонільних групах; аміногрупі.	6
3	Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на основі біоізостерної заміни. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH ₂ , CH ₃ , OH-групи, S, NH, CH ₂ O-лінкери.	6
4	Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліків. Захисні групи в органічному синтезі.	6
	РАЗОМ	24
	<i>Змістовий модуль 2. Взаємозв'язок структура-активність як один з елементів методології drug-design</i>	
5	Побудова та аналіз прогностичних рівнянь кількісної залежності структура-активність (QSAR-аналіз). Розрахунок молекулярних	3

	дескрипторів.	
6	Стероїдні гормони та структурно спорідненні сполуки, тритерпеноїди, методи одержання/модифікації взаємозв'язок структура-активність.	5
7	Похідні феніл(гетерил)етиламінів, як біогенні аміни та лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	5
8	Місцево-анестезуючі агенти, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Встановлення фармакофорного угруповання.	5
9	Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	4
10	Сульфаніламідні, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	6
11	Нестероїдні протизапальні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Пошук спільних та відмінних ознак в межах хімічних суб-класів.	6
12	Піридиновий цикл як приклад «прилевіюваних структур», методи синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.	6
13	Похідні піримідину (барбітурати) як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	6
14	Похідні пурину як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	6
15	β -Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.	6
	РАЗОМ	82
	<i>Кількість годин самостійної роботи</i>	82

7. МЕТОДИ НАВЧАННЯ

Основними методами навчання при вивченні курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів» є лекції та практичні заняття.

Завданням лекцій та практичних занять є вивчення основних сучасних стратегій пошуку нових лікарських засобів, (від емпіричного до цілеспрямованого пошуку нових лікарських засобів), використання сучасних технологій у пошуку нових лікарських засобів, методології “drug design” (конструювання лікарських засобів), теоретичних основ органічного синтезу та його основних етапів (окреслення структури цільової молекули, розгляд можливих схем синтезу, підбір продуктів, проведення хімічних реакцій, виділення проміжних і цільових продуктів, їх аналіз та очистку).

На заняттях студенти вивчають особливості 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, аналіз фармакологічних та хімічних груп лікарських засобів та біологічно-активних сполук.

Контроль вивчення курсу за вибором, засвоєння теоретичного матеріалу та практичних навиків викладачі здійснюють за допомогою тестів формату А та усного опитування. Тестові питання і ситуаційні задачі складені на основі матеріалу, зазначеного в змісті теми і наведеного в методичних рекомендаціях для кожного заняття.

8. МЕТОДИ КОНТРОЛЮ

Основними методами контролю при вивченні курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів» є поточний контроль та підсумковий семестровий контроль у формі заліку.

Поточний контроль здійснюється на кожному практичному занятті згідно з конкретними цілями теми. На всіх практичних заняттях застосовується об'єктивним контроль теоретичної підготовки та засвоєння практичних навичок.

На кожному практичному занятті студент відповідає на тестові завдання, питання за темою практичного заняття, знання яких необхідні для розуміння поточної теми, питання лекційного курсу і самостійної роботи, які стосуються поточного заняття, демонструє знання та вміння практичних навичок згідно з темою лабораторного заняття.

Самостійна робота студентів оцінюється під час поточного контролю теми на відповідному занятті. Засвоєння тем, які виносяться лише на самостійну роботу, контролюється при підсумковому контролі.

Підсумковий контроль проводиться з метою оцінювання результатів навчання на певному освітньо-кваліфікаційному рівні та на окремих його завершених етапах за національною шкалою та шкалою ECTS. Підсумковий контроль включає семестровий контроль та атестацію студента.

Семестровий контроль з курсу за вибором «Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів» проводиться у формі заліку в кінці 8 семестру в обсязі навчального матеріалу, визначеного робочою програмою з дисципліни і в терміни, встановлені робочим навчальним планом або індивідуальним навчальним планом студента.

Семестровий залік – це форма підсумкового контролю, що полягає в оцінці засвоєння студентом навчального матеріалу з певної дисципліни виключно на підставі результатів виконання ним усіх видів навчальних робіт, передбачених робочою навчальною програмою. Семестровий залік виставляється за результатами поточного контролю.

9. РОЗПОДІЛ БАЛІВ, ЯКІ ОТРИМУЮТЬ СТУДЕНТИ

Максимальна кількість балів, яку може набрати студент при вивченні курсу за вибором за поточну навчальну діяльність за семестр, формою підсумкового контролю в кінці якого є залік, становить 200 балів.

Мінімальна кількість балів, яку повинен набрати студент за поточну навчальну діяльність для зарахування дисципліни, становить 120 балів.

Розрахунок кількості балів проводиться на підставі отриманих студентом оцінок за традиційною шкалою під час вивчення дисципліни впродовж семестру, шляхом обчислення середнього арифметичного (СА), округленого до двох знаків після коми. Отримана величина конвертується у бали за багатобальною шкалою таким чином:

$$x = \frac{CA \times 200}{5}$$

Таблиця 1

4-бальна шкала	200-бальна шкала
5	200
4.97	199
4.95	198
4.92	197
4.9	196
4.87	195
4.85	194
4.82	193
4.8	192
4.77	191
4.75	190
4.72	189
4.7	188
4.67	187
4.65	186
4.62	185
4.6	184
4.57	183
4.55	182
4.52	181
4.5	180

4-бальна шкала	200-бальна шкала
4.47	179
4.45	178
4.42	177
4.4	176
4.37	175
4.35	174
4.32	173
4.3	172
4.27	171
4.24	170
4.22	169
4.19	168
4.17	167
4.14	166
4.12	165
4.09	164
4.07	163
4.04	162
4.02	161
3.99	160
3.97	159

4-бальна шкала	200-бальна шкала
3.94	158
3.92	157
3.89	156
3.87	155
3.84	154
3.82	153
3.79	152
3.77	151
3.74	150
3.72	149
3.7	148
3.67	147
3.65	146
3.62	145
3.6	144
3.57	143
3.55	142
3.52	141
3.5	140
3.47	139
3.45	138

4-бальна шкала	200-бальна шкала
3.42	137
3.4	136
3.37	135
3.35	134
3.32	133
3.3	132
3.27	131
3.25	130
3.22	129
3.2	128
3.17	127
3.15	126
3.12	125
3.1	124
3.07	123
3.05	122
3.02	121
3	120
Менше 3	Недостатньо

Визначення кількості балів, яку набрав студент з дисципліни

Оцінка з курсу за вибором за семестр, формою підсумкового контролю якого є залік, базується на результатах поточної навчальної діяльності та виражається за двобальною шкалою «зараховано» або «незараховано». Для зарахування студент має отримати за поточну навчальну діяльність бал, не менший 60% суми балів з дисципліни відповідно до Таблиці 1 (120 балів).

Бали з курсу за вибором незалежно конвертуються як в шкалу ETCS, так і в 4-бальну шкалу. Бали шкали ETCS у 4-бальну шкалу не конвертуються, і навпаки.

Бали студентів, які навчаються за однією спеціальністю, з урахуванням кількості балів, набраних з дисципліни ранжуються за шкалою ETCS таким чином:

Оцінка ETCS	Статистичний показник
A	Найкращі 10% студентів
B	Наступні 25% студентів
C	Наступні 30% студентів
D	Наступні 25% студентів
E	Останні 10% студентів

Бали з дисципліни для студентів, які успішно виконали програму, конвертуються у традиційну 4-ри бальну шкалу за абсолютними критеріями, які наведено нижче у таблиці:

Бали з дисципліни	Оцінка за 4-ри бальною шкалою
Від 170 до 200 балів	5
Від 140 до 169 балів	4
Від 139 до мінімальної кількості балів, яку повинен набратистудент	3
Нижче мінімальної кількості балів, яку повинен набрати студент	2

Оцінка ECTS у традиційну шкалу не конвертуються, оскільки шкала ECTS та чотирибальна шкала незалежні.

10. ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ, ЩО ВІНОСЯТЬСЯ НА ПІДСУМКОВИЙ КОНТРОЛЬ

«Теоретичні основи синтезу і зв'язок між структурою і дією лікарських засобів»

1. 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 очистку.
2. Однореакторні приклади синтезу поліфункціональних сполук.
3. Способи покращення ADME/Tox параметрів біологічно-активних сполук: модифікації по гідрокси-, меркаптогрупах; карбокси-, карбамілокси і карбонільних групах; аміногрупі.
4. Фармакофорні угруповання. Варіабельність молекул на основі біоізостерної заміни.
5. Пептидний і подвійний зв'язок; альдегідні та імінні групи, SH, NH₂, CH₃, OH-групи, S, NH, CH₂ O-лінкери.
6. Синтетичні методи отримання подвійних-, двійних-, гібридних-молекул як біологічно-активних сполук, методи синтезу про-ліків.
7. Захисні групи в органічному синтезі.
8. Побудова та аналіз прогностичних рівнянь кількісної залежності структура-активність (QSAR-аналіз).
9. Розрахунок молекулярних дескрипторів. Поняття лікоподібності та його використання. Правила Ліпінського.
10. Стероїдні гормони та структурно спорідненні сполуки, тритерпеноїди, методи одержання/модифікації взаємозв'язок структура-активність.
11. Похідні феніл(гетерил)етиламінів, як біогенні аміни та лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.
12. Місцево-анестезуючі агенти, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Встановлення фармакофорного угруповання.
13. Серотонінергічні засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.

14. Сульфаніламідні, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.
15. Нестероїдні протизапальні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність. Пошук спільних та відмінних ознак в межах хімічних суб-класів.
16. Піридиновий цикл як приклад «прилевіюваних структур», методи синтезу/модифікації похідних піридину, взаємозв'язок структура-активність.
17. Похідні піримідину (барбітурати) як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.
18. Похідні пурину як лікарські засоби та біологічно активні сполуки, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.
19. β -Лактамні антибіотики, як напівсинтетичні та синтетичні лікарські засоби, методи синтезу/модифікації. Взаємозв'язок структура-активність.

11. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Орлов В.Д., Липсон В.В., Иванов В.В. Медицинская химия. Харьков: Фолио, 2005.
2. Граник В.Г. Основы медицинской химии. М.: Вузовская книга, 2001.
3. Коваленко С.Н., Друшляк А.Г., Черных В.П. Основы комбинаторной органической химии. Харьков: Изд. НФАУ “Золотые страницы”, 2003.
4. Смит В. Бочков А. Органический синтез: наука и искусство,— М.: Мир, 2001. — 573 с.
5. Corey E.J., Chelg X.-M. The Logic of Chemical Synthesis, Willey 1996
6. Джилкрист Т. Химия гетероциклических соединений, Молсква, Мир, 1996-465 с.
7. J. Li, D. S. Johnson, D.R. Sliskovic, B.D. Roth Contemporary Drug Synthesis Wiley 2004-221p.
8. Якобсон С.В. Синтез лекарств – Москва, 1986 – 221с.
9. Wilson and Gisvold’s textbook of organic of organic and pharmaceutical chemistry (Eds. J. Delgado, W. Remers) -10th ed. –Lippincot – 1998 -970p.
10. А.А.Рагойша Поиск химической информации в Интернете. Ч. I. Поисковые системы и тематические каталоги: Учеб. пособие для студ. хим. фак. – Мн.: БГУ, 2003.— 87 с.
11. Рагойша, А. А. Поиск химической информации в Интернете: научные публикации: учеб. пособие для студентов хим. фак. спец. 1-31 05 01 – Мн. : БГУ, 2007. — 71 с.
12. G. Patric (trans. E. Mikicuk-Olasik, M. Witczak) Chemia medyczna. Wydaw. Naukovo-techniczne, Warczawa – 2003 – 698s.
13. Ковтуненко В.О. Лікарські засоби з дією на периферійну нервову систему: Навчальний посібник для вузів - Київ : Б.в., 2005 . – 426 с.

14. Ковтуненко В.О. Лікарські засоби з дією на центральну нервову систему: Навчальний посібник для студентів природничих факультетів університетів - Київ, Перун, 1997.
15. Abraham D.J. Burgers Medicinal Chemistry and Drug Discovery. Vol. 1-8. Drug Discovery and Drug Development. // Wiley.- 2003.
16. Zejc Alfred, Gorczyca Maria. Chemia Lekow. – Warszawa.: Wydawnictwo Lekarskie PZWL, 1998.-814 p.
17. Зефирова О.Н., Зефиров Н. С. Медицинская химия. II. Методологические основы создания лекарственных препаратов // Вестник Моск. Ун-та.- Сер.2.Химия.-2000.- Т.41.-№2.-С.103-108.
18. Зими́на Т., Батраков В. Комбинаторная химия: новые задачи органического синтеза // Химия и жизнь-XXI век. -1999. -№9. -С.20-22.
19. Combinatorial & Solid Phase Organic Chemistry Handbook.- Louisville, Kentucky: Advanced ChemTech Inc.- 1998.- 400 p.
20. Kiec-Kononowicz K. Wybrane zagadnienia z metod poszukiwania i otrzymywania srodkow leczniczych // Krakow.: Wydawnictwo Uniwersytetu Jagiellonskiego, 2000.- 318 s.
21. Розенблит А.Б., Голендер В.Е. Логико- комбинаторные методы в конструировании лекарств // Рига: Зинатне. -1983. –352 с.
22. Куби́ньи Г. В поисках новых соединений-лидеров для создания лекарств // Рос. хим. журн. 2006. – №2. – С.5-17.
23. Зефиров Н.С., Зефирова О.Н. Рациональный дизайн лекарств // химия и жизнью – 2004. - №11. – С.6-9.
24. Лекційний матеріал.