

## НАЗВА ДИСЦИПЛІНИ: НОВІТНІ МЕТОДИ РОЗРОБКИ ЛІКАРСЬКИХ ЗАСОБІВ

Перелік дисциплін вільного вибору аспіранта  
ДВА.03.01.16

### ВИКЛАДАЧ:

Ярмолюк Сергій Миколайович, д.х.н., професор, завідувач відділу біомедичної хімії Інституту молекулярної біології і генетики НАН України, e-mail: serhiy.yarmoluk@gmail.com

**ЗАГАЛЬНЕ НАВАНТАЖЕННЯ:** 3 кредити ЄКТС

у т. ч. 32 години аудиторних занять (12 годин – лекційні заняття, 10 годин – семінари, 8 годин – модульні контрольні роботи, 2 години – консультації), 58 годин самостійної роботи.

### АНОТАЦІЯ

Дисципліна «Новітні методи розробки лікарських засобів» належить до переліку дисциплін вільного вибору аспіранта. Вона забезпечує особистісний і професійний розвиток аспіранта та спрямована на формування бази знань, достатньої для подальшої успішної самостійної дослідницької роботи при розробці нових ліків.

### МЕТА І ЗАВДАННЯ КУРСУ:

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

**Основним завданням курсу** є ознайомлення здобувачів 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, організації геномів вірусів, бактерій, грибів і найпростіших; останні досягнення в галузі розробки нових ліків.

### РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ, МЕТОДИ ВИКЛАДАННЯ І ФОРМИ ОЦІНЮВАННЯ

Результати навчання	Форми і методи викладання	Форми оцінювання
<p><b>знати:</b> 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.</p> <p><b>уміти:</b> самостійно застосовувати здобуті знання для емпіричного та комп'ютерного дизайну лікарських речовин, аналізувати сучасні тенденції зі створення новітніх</p>	<p><b>форми:</b> лекція, семінар</p> <p><b>методи:</b> пояснювально-ілюстративний, репродуктивний, частково-пошуковий, дослідницький методи, метод проблемного викладу</p>	<p>– поточне оцінювання (письмові контрольні роботи);</p> <p>– підсумкове оцінювання (іспит).</p>

<p>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 шляхи моделювання потенційно біологічно активних сполук.</p>		
---	--	--

## ЗМІСТ КУРСУ

### Вступне слово

Вивчення курсу «Новітні методи розробки лікарських засобів» – необхідний етап підготовки висококваліфікованих спеціалістів-біологів для національної фармацевтичної промисловості. Сучасні та майбутні досягнення української системи охорони здоров'я залежать і будуть залежати від здатності вітчизняних науковців створювати ліки з необхідними українському суспільству властивостями, чому активно сприяють успіхи молекулярної біології, медичної хімії та біоінформатики.

Окрім фундаментальних знань з медичної хімії, у програмі курсу подано матеріал із практичного застосування здобутих знань з розробки та ресстрації 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.

### Тематичний план

Номер лекції	Назва лекції	Кількість годин				
		лекції	семінар	модульні КР	СР	консультації
<b>ЗМ1: Основні методології, що використовуються для розробки нових ліків. Раціональний дизайн ліків</b>						
1	Сучасні тенденції розвитку фармакологічного ринку. Основні методології, що використовувалися і використовуються для пошуку та розробки ліків. Короткий історичний огляд.	2			10	
2	Загальні принципи раціонального дизайну. Два основні його типи: на основі просторової структури мішені та на основі структури ліганду.	2	2	2	9	

**ЗМ2: Біоінформатика в розробці ліків. Дизайн ліків на основі структури мішені та на основі структури ліганду**

3	Біоінформатика в розробці ліків. Дизайн ліків на основі структури мішені.	2	2	2	9	
4	Дизайн ліків на основі структури ліганду.	2	2	2	10	

**ЗМ3: Процедура розробки ліків у США й Україні**

5	Сучасна законодавчо затверджена процедура розробки ліків на прикладі США. Процедура розробки ліків в Україні.	2	2		10	
---	---	---	---	--	----	--

**ЗМ4: Передбачення та оптимізація фармакодинамічних і фармакокінетичних (ADME/Tox) властивостей потенційних ліків**

6	Передбачення та оптимізація фармакодинамічних і фармакокінетичних (ADME/Tox) властивостей потенційних ліків.	2	2	2	10	2
<b>ВСЬОГО</b>		<b>12</b>	<b>10</b>	<b>8</b>	<b>58</b>	<b>2</b>

**УМОВИ ВИЗНАЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОГО РЕЙТИНГУ**

Форми оцінювання	Кількість	Максимум балів за 1	Разом
Модульна контрольна робота	4	15 (1 і 2-га роботи) 20 (3 і 4-та роботи)	70
Іспит	1	30	30
Разом			100

**ВИМОГИ І КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ**

Види робіт	Кількість балів за один вид робіт	Критерії оцінювання
Письмова робота (контрольна)	15/20	Робота демонструє належний рівень знань і розуміння аспірантом матеріалу, виявляє його аналітичні здібності, здатність до самостійного, системного, логічного й послідовного мислення. Роботу оформлено відповідно до вимог.
	8–14/11–19	Аспірант демонструє достатню обізнаність з матеріалом. Виклад має логічний і послідовний характер, однак у тексті наявні певні фактографічні неточності. Окремим частинам викладу бракує аналітичного характеру.

	1–7/1–10	Аспірант демонструє достатню обізнаність з матеріалом, однак роботі суттєво бракує систематичного аналізу й логічного та послідовного викладу. Робота містить фактографічні неточності та/або необґрунтовані судження.
	0	Завдання не виконане у визначений викладачем термін або містить плагіат.

**Порядок перерахунку рейтингових показників  
нормованої 100-бальної шкали оцінювання в національну шкалу і шкалу ЄКТС**

За 100-бальною шкалою	За національною шкалою	За шкалою ЄКТС
	ІСПИТ	
90–100	Відмінно	<b>A</b> (відмінно)
85–89	Добре	<b>B</b> (дуже добре)
75–84		<b>C</b> (добре)
65–74	Задовільно	<b>D</b> (задовільно)
60–64		<b>E</b> (достатньо)
40–59	Незадовільно	<b>FX</b> (незадовільно – з можливістю повторного складання)
1–39		<b>F</b> (неприйнятно)

Мінімальний рівень оцінки за роботу в семестрі з курсу «Новітні методи розробки лікарських засобів» (допуск до іспиту) складає 40 балів. У разі отримання оцінки «неприйнятно» (нижче 40 балів) здобувач не допускається до складання іспиту. У разі отримання оцінки «незадовільно» здобувач має право на два перескладання: викладачеві та комісії. Максимальна підсумкова оцінка після перескладання може бути лише «задовільно».

**ПОЛІТИКА ДОБРОЧЕСНОСТІ**

Виконання навчальних завдань і робота в курсі має відповідати вимогам «Кодексу Академічної доброчесності ІМБГ НАНУ», затвердженого Вченою радою ІМБГ НАН України 10 вересня 2019 року, [http://imbg.org.ua/docs/education/IMBG\\_academic\\_integrity\\_code.pdf](http://imbg.org.ua/docs/education/IMBG_academic_integrity_code.pdf)

**РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА**

**Основні:**

1. Kubinyi H. In Search for New Leads. – EFMC – Yearbook, 2003. – P. 14-28.
2. Sliwoski G., Kothiwale S., Meiler J., Lowe E.W. Jr. Computational Methods in Drug Discovery // Pharmacol Rev. – 2014. – 66. – P. 334-395.
3. Graham L. Patrick. An Introduction to Medicinal Chemistry. – Oxford University Press, 2013. – 788 p.
4. <http://labprice.ua/statti/nauka-i-virobnitstvo/korotko-pro-suchasnu-tehnologiyu-rozrobki-likiv/>
5. <http://labprice.ua/statti/chi-isnuye-v-ukrayini-ratsionalniy-dizayn-novitnya-tehnologiya-rozrobki-likiv/>

**Додаткові:**

1. Golub A.G., Yakovenko O.Y., Bdzhola 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., Bdzhola 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.
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-autsorsingu-naukovih-doslidzen-na-zamovlennya/>
5. <http://labprice.ua/statti/nauka-i-virobnitstvo/v-ukrayini-rozrobki-novih-likiv-ne-potribni-hto-zaperechit/>

**Періодична література (фахові журнали):**

1. ACS CHEMICAL NEUROSCIENCE Monthly 1948-7193 USA
2. ACS COMBINATORIAL SCIENCE Bimonthly 2156-8952 USA
3. ACS MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS Monthly 1948-5875 USA
4. ARCHIV DER PHARMAZIE Monthly 0365-6233 USA
5. ARZNEIMITTEL-FORSCHUNG-DRUG RESEARCH Monthly 0004-4172 GERMANY
6. BIOANALYSIS Monthly 1757-6180 ENGLAND
7. BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY Semimonthly 0968-0896 ENGLAND
8. BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY LETTERS Semimonthly 0960-894X ENGLAND
9. CHEMBIOCHEM Semimonthly 1439-4227 USA
10. CHEMICAL & PHARMACEUTICAL BULLETIN Monthly 0009-2363 JAPAN
11. CHEMMEDCHEM Monthly 1860-7179 USA
12. CHIRALITY Monthly 0899-0042 USA
13. JOURNAL OF ENZYME INHIBITION AND Bimonthly 1475-6366 ENGLAND
14. JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY Semimonthly 0022-2623 USA
15. JOURNAL OF MEDICINAL FOOD Quarterly 1096-620X USA
16. JOURNAL OF MEDICINAL PLANTS RESEARCH Semimonthly 1996-0875 NIGERIA

**Інститут молекулярної біології і генетики**

Національна академія наук України

**Institute of Molecular Biology and Genetics**

National Academy of Sciences of Ukraine

17. JOURNAL OF NATURAL MEDICINES Quarterly 1340-3443 JAPAN

18. JOURNAL OF NATURAL PRODUCTS Monthly 0163-3864 USA