

Код та назва дисципліни	2-Е3-102-03 Дизайн лікарських речовин/ Drug Design
Рекомендується для галузі знань (спеціальності, освітньої програми)	Е3(102) Хімія; G1(161) Хімічні технології та інженерія; G13(181) Харчові технології; Е1 Біологія та біохімія (091 Біологія)
Кафедра (зазначати офіційний шифр)	Фізичної, органічної та неорганічної хімії
П.І.П. НПП (за можливості)	Оковитий Сергій Іванович
Рівень ВО	Другий (магістерський)
Курс, семестр (в якому буде викладатись)	Курс 1, 2
Мова викладання	українська
Пререквізити (передумови вивчення дисципліни)	Знання з «Органічної хімії», «Аналітичної хімії», «Загальної та неорганічної хімії», «Фізичної та колоїдної хімії»
Чому це цікаво/треба вивчати	Здобуття базових знань щодо основних понять й теоретичних засад сучасних технологій розробки нових лікарських препаратів (віртуальний скринінг, молекулярне моделювання, докінг, QSAR-аналіз, оптимізація структури сполук-лідерів, комбінаторна хімія, високоефективний скринінг, напівемпіричний і QM/MM розрахунок комплексів фермент – ліганд, тощо) та доступних пакетів комп'ютерних програм для реалізації цієї задачі. Перспективи залучення випускників магістратури до роботи в науково-дослідних підрозділах та промислових підприємствах фармацевтичної галузі
Перелік тем дисципліни	Молекулярний дизайн біологічно активних сполук Computer aided drug design. Мішень. Спрямований пошук лікарських засобів. Дизайн ліків на основі структури мішені. Дизайн ліків на основі структури ліганду. Молекулярний докінг і віртуальний скринінг. Прогнозування біологічної активності методами QSAR. Передбачення та оптимізація фармакодинамічних і фармакокінетичних (ADME/Tox) властивостей потенційних ліків. Розробка <i>de novo</i> дизайну лікарських засобів.
Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)	Здатність здійснювати раціональний дизайн лікарських засобів на основі знань з молекулярної біології, фармакології, хімії. Володіння методами комп'ютерного моделювання (in silico) – молекулярного докінгу, фармакофорного аналізу, QSAR-моделювання, молекулярної динаміки. Здатність аналізувати взаємодії «лікарська речовина – мішень дії» (ферменти, рецептори, нуклеїнові кислоти), визначати ключові структурні ознаки активності (SAR/QSAR). Розуміння сучасних підходів до розробки ліків, зокрема: таргетної терапії, дизайн на основі структури мішені (Structure-Based Drug Design), фрагментний дизайн тощо. Здатність критично оцінювати результати молекулярного моделювання з урахуванням експериментальних фармакологічних даних. Знання і вміння працювати з базами даних (PubChem, ChEMBL, DrugBank, PDB, ZINC, BindingDB тощо). Навички роботи з програмним забезпеченням для молекулярного моделювання (AutoDock, Schrödinger, MOE, SwissADME, PyRx, Discovery Studio, KNIME тощо).

	Здатність візуалізувати і аналізувати молекулярні структури та їх взаємодії з мішенями (ліганд-макромолекула). Вміння оцінювати ADMET-профіль потенційних ліків (адсорбція, розподіл, метаболізм, виведення, токсичність). Здатність працювати над створенням «розумних» препаратів (наприклад, про-ліків, таргетних нанопрепаратів тощо). Здатність розв'язувати спеціалізовані задачі та практичні проблеми в галузі фармацевтичної хімії
Очікувані результати навчання	Знати головні принципи дизайну нових молекулярних структур потенційних ліків, основи застосування базового програмного забезпечення для комп'ютерного моделювання потенційного лікарського препарату. Вміти самостійно застосовувати здобуті знання для емпіричного та комп'ютерного дизайну лікарських речовин (віртуальний скринінг, молекулярний докінг, QSAR-аналіз, оптимізація структури сполук-лідерів, напівемпіричний і QM/MM розрахунок комплексів фермент – ліганд), 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. Знати сучасні підходи до створення нових лікарських засобів із застосуванням засобів хемоінформатики та молекулярного комп'ютерного моделювання. Знати алгоритм створення лікарських препаратів, методи прогнозування фармацевтичної активності сполук
Інформаційне забезпечення	Методичні матеріали, лекції, презентації Оковитий С.І. Борисенко І.О. Квантово-хімічне дослідження структури та реакційної здатності хімічних сполук. Методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт – Д.: РВВ ДНУ, 2021. Оковитий С.І. Борисенко І.О. Прикладна комп'ютерна хімія. Методичні рекомендації до виконання лабораторних робіт. – Електронне видання. Д. – Д., 2023
Види навчальних занять (лекції, практичні, семінарські, лабораторні заняття тощо)	Лекції, лабораторні заняття
Вид семестрового контролю	диференційований залік
Максимальна кількість здобувачів/ Мінімальна кількість здобувачів (тільки для мовних та творчих дисциплін)	Без обмежень

Декан хімічного факультету

Світлана КОПТЄВА