

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Медицинская химия с элементами комбинаторики»

Дисциплина «Медицинская химия с элементами комбинаторики» разработана для магистрантов, обучающихся по направлению 04.04.01 «Химия» по профилю «Фундаментальные химические исследования веществ и процессов».

При разработке рабочей программы учебной дисциплины использован Образовательный стандарт ВО ДВФУ по направлению подготовки 04.04.01 – Химия, утвержденный приказом ректора ДВФУ от 04.04.2016 № 12-13-592 и учебный план образовательной программы.

Дисциплина «Медицинская химия с элементами комбинаторики» относится к вариативной части учебного плана разделу «дисциплины по выбору» Б1.В.ДВ.04.04. Трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц (216 час.). Дисциплина включает 14 час. лекций, 72 час. лабораторных работ и 166 час. самостоятельной работы, из которых 36 часов отводится на подготовку к экзамену. Реализуется дисциплина в 3 семестре. Форма промежуточной аттестации: экзамен (3 семестр).

В рамках данной дисциплины рассматриваются основные методы направленного создания новых лекарственных препаратов, включая комбинаторную химию, математический аппарат QSAR (количественная зависимость структура – активность), а также основы методов молекулярного моделирования для предсказания биологической активности органических соединений. Данный курс неразрывно связан со следующими дисциплинами направления подготовки бакалавров 04.03.01 «Химия», профиль «Фундаментальная химия»: «Математика», «Органическая химия», «Химические основы биологических процессов», «Основные классы природных соединений», «Механизмы реакций и стереохимия», «Методы выделения и установления строения органических молекул».

Цель изучения данной дисциплины заключается в формировании у обучающихся профессиональных компетенций, необходимых для проведения исследований в области создания новых лекарственных препаратов.

Задачи:

- Освоить теоретические основы и методологию комбинаторного синтеза как способа выявления новых биологически активных веществ (БАВ).
- Сформировать фундаментальные знания о принципах и алгоритмах компьютерного моделирования взаимодействия низкомолекулярных соединений с терапевтическими мишенями, облегчающего оптимизацию

БАВ, а также позволяющие оценить вклад отдельных структурных фрагментов молекулы в формирование ее биологической активности.

- Изучить математический аппарат QSAR, позволяющий установление функциональной зависимости структура - биологическая активность в ряду исследуемых веществ для создания наиболее активных соединений.

Для успешного изучения дисциплины «Медицинская химия с элементами комбинаторики» у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции:

- способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач.
- владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций.
- Способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности.
- способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам.
- владением системой фундаментальных химических понятий.
- способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов.
- владением методами безопасного обращения с химическими материалами с учетом их физических и химических свойств

В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие общекультурные/ общепрофессиональные/ профессиональные компетенции (элементы компетенций).

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
ОПК-2 - владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и	Знает	-основные алгоритмы, применяемые в информатике для нахождения экстремума функций большого числа переменных, -современные статистические методы и основы функционирования нейронных сетей
	Умеет	-пользоваться интерфейсом программного обеспечения для конструирования и визуализации моделей молекул, проведения молекулярного докинга и расчетов QSAR
	Владеет	-навыком самостоятельной работы в среде программного обеспечения для конструирования

передаче научной информации		и визуализации моделей молекул, проведения молекулярного докинга и расчетов QSAR
ПК-2 - владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Знает	-теоретические основы комбинаторного синтеза, молекулярного докинга и QSAR
	Умеет	-определять целевую терапевтическую мишень в отношении исследуемых соединений, -проводить молекулярный докинг исследуемых соединений с терапевтической мишенью, -выявлять зависимость структура-активность в ряду соединений с известной биологической активностью, -проводить параллельный синтез библиотек соединений
	Владеет	-навыком оптимизации структуры исследуемого соединения с использованием направленных методов увеличения сродства к терапевтической мишени

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Медицинская химия с элементами комбинаторики» применяются следующие методы активного/ интерактивного обучения: лекции-беседы.