

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет»  
Министерства здравоохранения Российской Федерации

Факультет промышленной технологии лекарств

Кафедра органической химии

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ  
В Т.Ч. ОЦЕНОЧНЫЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ**

**Б1.В.09 МЕДИЦИНСКАЯ ХИМИЯ**

Направление подготовки: 04.04.01 Химия

Профиль подготовки: Медицинская химия и дизайн молекул

Формы обучения: очная

Квалификация, присваиваемая выпускникам: Магистр

Год набора: 2023

Срок получения образования: очная форма обучения – 2 года

Объем: в зачетных единицах: 6 з.е.  
в академических часах: 216 ак.ч.

**Разработчики:**

Кандидат химических наук, доцент Чернов Н. М.

Кандидат фармацевтических наук, доцент Куваева Е. В.

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 № 655

**Согласование и утверждение**

№	Подразделение или коллегиальный орган	Ответственное лицо	ФИО	Виза	Дата, протокол (при наличии)
1	Кафедра органической химии	Ответственный за образовательную программу	Чернов Никита Максимович	Согласовано	01.05.2022
2	Кафедра органической химии	Заведующий кафедрой, руководитель подразделения, реализующего ОП	Яковлев Игорь Павлович	Рассмотрено	15.06.2022, № 11
3	Методическая комиссия факультета	Председатель методической комиссии	Алексеева Галина Михайловна	Согласовано	01.07.2022, № 7

**Согласование и утверждение образовательной программы**

№	Подразделение или коллегиальный орган	Ответственное лицо	ФИО	Виза	Дата, протокол (при наличии)
1	факультет промышленной технологии лекарств	Декан, руководитель подразделения	Куваева Елена Владимировна	Согласовано	23.06.2022, № 11

## СОДЕРЖАНИЕ

1.	Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2.	Место дисциплины в структуре ОП	5
3.	Объем дисциплины и виды учебной работы	5
4.	Содержание дисциплины	6
4.1.	Разделы, темы дисциплины и виды занятий	6
4.2.	Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля	7
4.3.	Содержание занятий лекционного типа.	9
4.4.	Содержание занятий семинарского типа	10
4.5.	Содержание занятий семинарского типа	11
4.6.	Содержание занятий семинарского типа	12
4.7.	Содержание самостоятельной работы обучающихся	13
5.	Порядок проведения промежуточной аттестации	15
6.	Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины	15
6.1.	Перечень основной и дополнительной учебной литературы	15
6.2.	Профессиональные базы данных и ресурсы «Интернет», к которым обеспечивается доступ обучающихся	15
6.3.	Программное обеспечение и информационно-справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	15
6.4.	Специальные помещения, лаборатории и лабораторное оборудование	16
7.	Методические материалы по освоению дисциплины	17
8.	Оценочные материалы	18

## 1. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

*Компетенция(и), индикатор(ы) и результаты обучения*

ПК-ПЗ Способен выдвигать концепции направленной структурной модификации соединения-лидера, опираясь на информацию о его строении и действия на молекулярную мишень

ПК-ПЗ.1 Использует базовые принципы дизайна структур биологически активных веществ для направленной модификации соединений-лидеров

*Знать:*

ПК-ПЗ.1/Зн1 Знать основные структурные особенности, влияющие на фармакокинетические свойства молекулы

ПК-ПЗ.1/Зн2 Знать основные процессы метаболизма ксенобиотиков

ПК-ПЗ.1/Зн3 Знать основные группы биоизостеров

ПК-ПЗ.1/Зн4 Знать основные токсикофорные фрагменты

ПК-ПЗ.2 Применяет на практике принципы конструирования и оптимизации структур веществ с заранее заданной биологической активностью

*Уметь:*

ПК-ПЗ.2/Ум2 Уметь предлагать обоснованные структурные модификации вещества с целью оптимизации скорости всасывания

ПК-ПЗ.2/Ум3 Уметь предлагать обоснованные структурные модификации вещества с целью оптимизации метаболизма

ПК-ПЗ.2/Ум4 Уметь предлагать обоснованные структурные модификации вещества с целью снижения токсичности

ПК-ПЗ.2/Ум5 Уметь осуществлять поиск по электронным базам данных биологически активных веществ

ПК-П1 Способен проводить научные исследования в области установления механизма взаимодействия биологически активного вещества с молекулярной мишенью

ПК-П1.3 Использует сведения о механизме действия лекарственных препаратов для анализа взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями

*Знать:*

ПК-П1.3/Зн1 Знать теоретические основы взаимодействия лекарств с мишенью

ПК-П1.3/Зн2 Знать основные классы мишеней и механизмы передачи биологического сигнала

ПК-П1.4 Анализирует механизм взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями

*Уметь:*

ПК-П1.4/Ум2 Уметь определять тип ингибирования фермента лигандом

ПК-П2 Способен проводить научные исследования по определению связи структуры и активности органических веществ с заданной биологической активностью

ПК-П2.3 Использует данные компьютерного моделирования для установления связи структуры и биологической активности

*Знать:*

ПК-П2.3/Зн1 Знать основные понятия в ранней разработке лекарственных веществ

ПК-П2.3/Зн2 Знать основные пути получения потенциальных хитов

## 2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина Б1.В.09 «Медицинская химия» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 3.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.08 Компьютерный дизайн молекул;

Б1.В.02 Молекулярная биология;

Б1.В.05 Управление проектами;

Б1.В.07 Фармакология;

Б1.В.03 Физиология;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б3.О.01(Д) Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы;

Б2.В.01(Пд) производственная практика, преддипломная практика;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

## 3. Объем дисциплины и виды учебной работы

*Очная форма обучения*

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Практические занятия (часы)	Лекции (часы)	Консультации в период теоретического обучения (часы)	Консультации в период сессии (часы)	Самостоятельная работа студента (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
Третий семестр	216	6	68	32	24	10	2	114	Экзамен

									(34)
Всего	216	6	68	32	24	10	2	114	34

#### 4. Содержание дисциплины

##### 4.1. Разделы, темы дисциплины и виды занятий

*Очная форма обучения*

Наименование раздела, темы	Всего	Лекции	Практические занятия	Самостоятельная работа студента	Консультации в период сессии	Консультации в период теоретического обучения	Планируемые результаты обучения, соотнесенные с результатами освоения программы
<b>Раздел 1. Введение, предмет и задачи медицинской химии.</b>	<b>10</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>6</b>			ПК-П1.3 ПК-П1.4
Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства.	10	2	2	6			
<b>Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств.</b>	<b>67</b>	<b>8</b>	<b>12</b>	<b>42</b>	<b>1</b>	<b>4</b>	ПК-П1.3 ПК-П1.4
Тема 2.1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования.	11	2	2	6		1	
Тема 2.2. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом.	10	2	2	6			
Тема 2.3. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады.	11	2	2	6		1	
Тема 2.4. Неферментативные и нерцепторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени.	19	2	4	12		1	
Тема 2.5. Биологические мишени действия лекарств.	16		2	12	1	1	
<b>Раздел 3. Этапы и методы создания лекарственного вещества.</b>	<b>105</b>	<b>14</b>	<b>18</b>	<b>66</b>	<b>1</b>	<b>6</b>	ПК-П2.3 ПК-П3.1 ПК-П3.2
Тема 3.1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор.	10	2	2	6			

Тема 3.2. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение.	11	2	2	6		1
Тема 3.3. Метаболизм и экскреция.	10	2	2	6		
Тема 3.4. Биоизостерия.	11	2	2	6		1
Тема 3.5. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики.	11	2	2	6		1
Тема 3.6. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью.	11	2	2	6		1
Тема 3.7. Современные методы и проблемы медицинской химии.	10	2	2	6		
Тема 3.8. Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств.	15		2	12		1
Тема 3.9. Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений.	16		2	12	1	1
<b>Итого</b>	<b>182</b>	<b>24</b>	<b>32</b>	<b>114</b>	<b>2</b>	<b>10</b>

#### 4.2. Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля

##### **Раздел 1. Введение, предмет и задачи медицинской химии.**

*Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства.*

Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

##### **Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств.**

*Тема 2.1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования.*

Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

*Тема 2.2. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом.*

Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

*Тема 2.3. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады.*

Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

*Тема 2.4. Неферментативные и нерцепторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени.*

Неферментативные и нерцепторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

*Тема 2.5. Биологические мишени действия лекарств.*

Биологические мишени действия лекарств.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Контрольная работа

***Раздел 3. Этапы и методы создания лекарственного вещества.***

*Тема 3.1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор.*

Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор. Обсуждение по теме. Анализ структур соединений и построение фармакофора.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

*Тема 3.2. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение.*

Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

*Тема 3.3. Метаболизм и экскреция.*

Метаболизм и экскреция.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

*Тема 3.4. Биоизостерия.*

Биоизостерия.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование

*Тема 3.5. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики.*

Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Собеседование
<i>Тема 3.6. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью.</i>
Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью.
Текущий контроль (очная форма обучения)
Вид (форма) контроля, оценочное средство
Собеседование
<i>Тема 3.7. Современные методы и проблемы медицинской химии.</i>
Современные методы и проблемы медицинской химии. Антимитозы.
Текущий контроль (очная форма обучения)
Вид (форма) контроля, оценочное средство
Собеседование
<i>Тема 3.8. Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств.</i>
Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств.
Текущий контроль (очная форма обучения)
Вид (форма) контроля, оценочное средство
Контрольная работа
<i>Тема 3.9. Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений.</i>
Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений.
Текущий контроль (очная форма обучения)
Вид (форма) контроля, оценочное средство
Кейс-задача

#### 4.3. Содержание занятий лекционного типа.

##### Очная форма обучения. Лекции (24 ч.)

##### **Раздел 1. Введение, предмет и задачи медицинской химии. (2 ч.)**

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства. (2 ч.)

1. Вводная лекция. Основные понятия и определения.

##### **Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств. (8 ч.)**

Тема 2.1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования. (2 ч.)

1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования.

Тема 2.2. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом. (2 ч.)

1. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом.

Тема 2.3. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады. (2 ч.)

1. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады.

Тема 2.4. Неферментативные и рецепторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени. (2 ч.)

1. Неферментативные и рецепторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени.

Тема 2.5. Биологические мишени действия лекарств.

##### **Раздел 3. Этапы и методы создания лекарственного вещества. (14 ч.)**

Тема 3.1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор. (2 ч.)

1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор.

Тема 3.2. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение. (2 ч.)

1. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение.

Тема 3.3. Метаболизм и экскреция. (2 ч.)

1. Метаболизм и экскреция

Тема 3.4. Биоизостерия. (2 ч.)

1. Биоизостерия.

Тема 3.5. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики. (2 ч.)

1. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики.

Тема 3.6. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью. (2 ч.)

1. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью.

Тема 3.7. Современные методы и проблемы медицинской химии. (2 ч.)

1. Современные методы и проблемы медицинской химии.

Тема 3.8. Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств.

Тема 3.9. Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений.

#### **4.4. Содержание занятий семинарского типа.**

##### **Очная форма обучения. Практические занятия (32 ч.)**

###### **Раздел 1. Введение, предмет и задачи медицинской химии. (2 ч.)**

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства. (2 ч.)

1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства. Обсуждение по теме занятия.

###### **Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств. (12 ч.)**

Тема 2.1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования. (2 ч.)

1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования. Обсуждение по теме занятия, решение задач.

Тема 2.2. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом. (2 ч.)

1. Рецепторы, методы оценки взаимодействия с лигандом. Обсуждение по теме занятия.

Тема 2.3. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады. (2 ч.)

1. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады. Обсуждение по теме занятия.

Тема 2.4. Неферментативные и нереперторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени. (4 ч.)

1. Ионные каналы и их фармакологическая регуляция. Обсуждение по теме занятия. (2 часа).

2. Неферментативные и нереперторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени. Обсуждение по теме занятия. (2 часа).

Тема 2.5. Биологические мишени действия лекарств. (2 ч.)

1. Контрольная работа 1 «Мишени действия лекарств». Написание и защита контрольной работы.

###### **Раздел 3. Этапы и методы создания лекарственного вещества. (18 ч.)**

Тема 3.1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор. (2 ч.)

1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор. Обсуждение по теме. Анализ структур соединений и построение фармакофора.

Тема 3.2. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение. (2 ч.)

1 Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение. Обсуждение по теме. Анализ структур соединений и обоснование структурных модификаций.

Тема 3.3. Метаболизм и экскреция. (2 ч.)

1 Метаболизм и экскреция. Обсуждение по теме. Анализ структур соединений и обоснование структурных модификаций.

Тема 3.4. Биоизостерия. (2 ч.)

1. Биоизостерия. Обсуждение по теме. Анализ структур соединений и обоснование структурных модификаций.

Тема 3.5. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики. (2 ч.)

1. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики. Обсуждение по теме. Анализ структур соединений и обоснование структурных модификаций.

Тема 3.6. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью. (2 ч.)

1 Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью. Обсуждение по теме. Анализ структур соединений и выявление потенциально нежелательных фрагментов.

Тема 3.7. Современные методы и проблемы медицинской химии. (2 ч.)

1. Антимитозы. Обсуждение по теме. Анализ структур соединений и выявление потенциально нежелательных фрагментов.

Тема 3.8. Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств. (2 ч.)

1 Контрольная работа 2 «Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств». Написание и защита контрольной работы.

Тема 3.9. Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений. (2 ч.)

1 Ситуационная задача «Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений». Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи.

#### **4.5. Содержание занятий семинарского типа.**

**Очная форма обучения. Консультации в период сессии (2 ч.)**

#### **Раздел 1. Введение, предмет и задачи медицинской химии.**

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства.

#### **Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств. (1 ч.)**

Тема 2.1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования.

Тема 2.2. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом.

Тема 2.3. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады.

Тема 2.4. Неферментативные и нереперторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени.

Тема 2.5. Биологические мишени действия лекарств. (1 ч.)

1. Консультация по подготовке к промежуточной аттестации по контрольным вопросам и заданиям раздела "Биологические мишени действия лекарств".

#### **Раздел 3. Этапы и методы создания лекарственного вещества. (1 ч.)**

Тема 3.1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор.

Тема 3.2. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение.

Тема 3.3. Метаболизм и экскреция.

Тема 3.4. Биоизостерия.

Тема 3.5. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики.

Тема 3.6. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью.

Тема 3.7. Современные методы и проблемы медицинской химии.

Тема 3.8. Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств.

Тема 3.9. Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений. (1 ч.)

1. Консультация по подготовке к промежуточной аттестации по контрольным вопросам и заданиям раздела "Этапы и методы создания лекарственного вещества".

#### **4.6. Содержание занятий семинарского типа.**

**Очная форма обучения. Консультации в период теоретического обучения (10 ч.)**

#### **Раздел 1. Введение, предмет и задачи медицинской химии.**

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства.

#### **Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств. (4 ч.)**

Тема 2.1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования".

Тема 2.2. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом.

Тема 2.3. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады".

Тема 2.4. Неферментативные и нереперторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Неферментативные и нереперторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени".

Тема 2.5. Биологические мишени действия лекарств. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Биологические мишени действия лекарств".

#### **Раздел 3. Этапы и методы создания лекарственного вещества. (6 ч.)**

Тема 3.1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор.

Тема 3.2. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение".

Тема 3.3. Метаболизм и экскреция.

Тема 3.4. Биоизостерия. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Биоизостерия".

Тема 3.5. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Смена хемотипа,

пролекарства. Пептидомиметики".

Тема 3.6. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью".

Тема 3.7. Современные методы и проблемы медицинской химии.

Тема 3.8. Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств".

Тема 3.9. Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений. (1 ч.)

1. Консультация по материалам литературы, практического занятия по теме "Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений".

#### **4.7. Содержание самостоятельной работы обучающихся**

**Очная форма обучения. Самостоятельная работа студента (114 ч.)**

#### **Раздел 1. Введение, предмет и задачи медицинской химии. (6 ч.)**

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

#### **Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств. (42 ч.)**

Тема 2.1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 2.2. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 2.3. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 2.4. Неферментативные и нереперторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени. (12 ч.)

Тема 2.5. Биологические мишени действия лекарств. (12 ч.)

#### **Раздел 3. Этапы и методы создания лекарственного вещества. (66 ч.)**

Тема 3.1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 3.2. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 3.3. Метаболизм и экскреция. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 3.4. Биоизостерия. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 3.5. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 3.6. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 3.7. Современные методы и проблемы медицинской химии. (6 ч.)

1. Подготовка к практическим занятиям: изучение лекционного материала и материалов основной литературы по соответствующей теме (4 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации: подготовка ответов на контрольные вопросы и задания (2 часа).

Тема 3.8. Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств. (12 ч.)

Тема 3.9. Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений. (12 ч.)

## **5. Порядок проведения промежуточной аттестации**

*Промежуточная аттестация: Экзамен, Третий семестр.*

Промежуточная аттестация организована в виде экзамена. Экзамен проводится по набору экзаменационных билетов, составляемых ответственным за курс, подписываемых заведующим кафедрой и утверждаемых проректором по учебной работе. Каждый билет

содержит 2 теоретических вопроса по компетенциям УК-6, ПК-1 и ПК-3 и задачу по компетенции УК-6, ПК-2 и ПК-3. Подготовка письменного ответа на задания билета составляет 2 часа, после чего следует устный опрос по заданиям билета.

По итогам ответа на каждое из заданий принимается решение о сформированности компетенции. В случае несформированности хотя бы одной из выше представленных компетенций ставится оценка «не удовлетворительно». В случае сформированности всех вынесенных на промежуточную аттестацию компетенций оценивание проводится по следующим критериям:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- умение работать с предоставленными спектральными данными;
- грамотность и связность изложения материала;
- самостоятельность работы, наличие собственной обоснованной позиции.

По итогам оценивания при условии сформированности всех вышепредставленных компетенций выставляется оценка «удовлетворительно», «хорошо» или «отлично».

## **6. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины**

### **6.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы**

#### *Основная литература*

1. Волкова,, Л. В. Организация проектных работ в строительстве, управление ими и их планирование: учебное пособие / Л. В. Волкова,, С. В. Волков,, В. Н. Шведов,. - Организация проектных работ в строительстве, управление ими и их планирование - Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный архитектурно-строительный университет, ЭБС АСВ, 2014. - 119 с. - 978-5-9227-0491-5. - Текст: электронный. // IPR SMART: [сайт]. - URL: <https://www.iprbookshop.ru/30009.html> (дата обращения: 21.06.2022). - Режим доступа: по подписке

2. Беляев,, В. А. Фармацевтическая химия: учебно-методическое пособие / В. А. Беляев,, Н. В. Федота,, Э. В. Горчаков,. - Фармацевтическая химия - Ставрополь: Ставропольский государственный аграрный университет, АГРУС, 2013. - 160 с. - 978-5-9596-0946-7. - Текст: электронный. // IPR SMART: [сайт]. - URL: <https://www.iprbookshop.ru/47376.html> (дата обращения: 21.06.2022). - Режим доступа: по подписке

### **6.2. Профессиональные базы данных и ресурсы «Интернет», к которым обеспечивается доступ обучающихся**

#### *Профессиональные базы данных*

1. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed> - База данных по биомедицинской литературе (Medline, США)

#### *Ресурсы «Интернет»*

1. <http://www.swissdock.ch/> - Комплекс онлайн сервисов для молекулярного моделирования биологически активных веществ

2. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/> - База данных о биологически активных веществах, их структуре и активности

### **6.3. Программное обеспечение и информационно-справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое свободно распространяемое и лицензионное ПО, в т.ч. MS Office.

Программное обеспечение для адаптации образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья:

Программа экранного доступа Nvda - программа экранного доступа к системным и офисным приложениям, включая web-браузеры, почтовые клиенты, Интернет-мессенджеры и офисные пакеты. Встроенная поддержка речевого вывода на более чем 80 языках. Поддержка большого числа брайлевских дисплеев, включая возможность автоматического обнаружения многих из них, а также поддержка брайлевского ввода для дисплеев с брайлевской клавиатурой. Чтение элементов управления и текста при использовании жестов сенсорного экрана.

*Перечень программного обеспечения*

*(обновление производится по мере появления новых версий программы)*

Не используется.

*Перечень информационно-справочных систем*

*(обновление выполняется еженедельно)*

Не используется.

#### **6.4. Специальные помещения, лаборатории и лабораторное оборудование**

Для обеспечения реализации дисциплины используется оборудование общего назначения, специализированное оборудование, оборудование, обеспечивающее адаптацию электронных и печатных образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья, наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий по списку.

**Специализированная многофункциональная учебная аудитория для проведения учебных занятий лекционного типа, семинарского типа (практических занятий), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, в том числе, для организации практической подготовки обучающихся, подтверждающая наличие материально-технического обеспечения, с перечнем основного оборудования:** проектор, персональные компьютеры с возможностью подключения к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду лицензиата, учебная мебель для педагогического работника и обучающихся (столы и стулья), экран для проектора, маркерная доска, спектрофотометр, микроцентрифуга, роторы мешалка магнитная, дозатор, микроскопы, система блоттинга программно-аппаратный комплекс для визуализации и документирования ЭФ гелей и блоттинга, мульти-ротатор термостат типа Драй-блок, камера электрофоретическая горизонтальная, дозатор центрифуга лабораторная с охлаждением система визуализации с функцией флуоресцентной детекции (197022, город Санкт-Петербург, улица Профессора Попова, д. 4, лит. В учебная аудитория № 1 (в соответствии с документами по технической инвентаризации - помещение № 319))

**Помещение для самостоятельной работы обучающихся, подтверждающее наличие материально-технического обеспечения, с перечнем основного оборудования:** персональные компьютеры с возможностью подключения к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду лицензиата, учебная мебель для педагогического работника и обучающихся (столы и стулья), маркерная доска (197022, город Санкт-Петербург, Аптекарский проспект, д. 6, лит. А, пом. 23Н учебная аудитория № 4 (в соответствии с документами по технической инвентаризации - часть помещения 23Н № 12))

**Помещение для самостоятельной работы обучающихся, подтверждающее наличие материально-технического обеспечения, с перечнем основного оборудования:** персональные компьютеры с возможностью подключения к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду лицензиата, учебная мебель для педагогического работника и обучающихся (столы и стулья), маркерная доска (197022, г. Санкт-

Санкт-Петербург, Аптекарский проспект, д.6, лит. А пом.29Н учебная аудитория № 8(в соответствии с документами по технической инвентаризации - часть помещения 29Н № 4))

Оборудование, обеспечивающее адаптацию электронных и печатных образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (место размещения - учебно-методический отдел, устанавливается по месту проведения занятий (при необходимости)):

Устройство портативное для увеличения DION OPTIC VISION - предназначено для обучающихся с нарушением зрения с целью увеличения текста и подбора контрастных схем изображения;

Электронный ручной видеоувеличитель Bigger D2.5-43 TV - предназначено для обучающихся с нарушением зрения для увеличения и чтения плоскочечатного текста;

Радиокласс (радиомикрофон) «Сонет-PCM» РМ-6-1 (заушный индиктор) - портативная звуковая FM-система для обучающихся с нарушением слуха, улучшающая восприятие голосовой информации.

## **7. Методические материалы по освоению дисциплины**

В ходе реализации учебного процесса по дисциплине проводятся учебные занятия и выполняется самостоятельная работа. По вопросам, возникающим в процессе выполнения самостоятельной работы, проводятся консультации.

Для организации и контроля самостоятельной работы обучающихся, а также проведения консультаций применяются информационно-коммуникационные технологии:

Информирование: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>

Консультирование: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>

Контроль: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>

Размещение учебных материалов: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>

Учебно-методическое обеспечение:

Ксенофонтова Г.В. Медицинская химия : электронный учебно-методический комплекс / Г.В.Ксенофонтова; ФГБОУ ВО СПХФУ Минздрава России. – Санкт-Петербург, 2018. – Текст электронный // ЭИОС СПХФУ : [сайт]. – URL: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>. — Режим доступа: для авторизованных пользователей.

### ***Методические указания по формам работы***

#### ***Консультации в период теоретического обучения***

Консультации в период теоретического обучения предназначены для разъяснения порядка выполнения самостоятельной работы и ответа на сложные вопросы в изучении дисциплины. В рамках консультаций проводится контроль выполнения обучающимся самостоятельной работы. Контроль осуществляется в следующей форме:

Кейс-задачи (ситуационные задачи)

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой проблемное задание, в котором обучающемуся предлагают осмыслить реальную профессионально-ориентированную ситуацию, необходимую для решения данной проблемы.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: задания для решения кейс-задачи.

Контрольной работы

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой средство проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: комплект контрольных заданий по вариантам.

Собеседование

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: вопросы по темам/разделам

### *Лекции*

Лекции предназначены для сообщения обучающимся необходимого для изучения дисциплины объема теоретического материала. В рамках лекций преподавателем могут реализовываться следующие интерактивные образовательные технологии: дискуссия, лекция с ошибками, видеоконференция, вебинар.

### *Практические занятия*

Практические занятия предусматривают применение преподавателем различных интерактивных образовательных технологий и активных форм обучения: дискуссия, деловая игра, круглый стол, мини-конференция. Текущий контроль знаний осуществляется на практических занятиях и проводится в форме:

Кейс-задачи (ситуационные задачи)

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой проблемное задание, в котором обучающемуся предлагают осмыслить реальную профессионально-ориентированную ситуацию, необходимую для решения данной проблемы.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: задания для решения кейс-задачи.

Контрольной работы

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой средство проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: комплект контрольных заданий по вариантам.

Собеседование

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: вопросы по темам/разделам дисциплины

## **ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ**

### **1. Шкала оценивания**

#### **1.1. Уровни овладения**

***Компетенция: ПК-П1 Способен проводить научные исследования в области установления механизма взаимодействия биологически активного вещества с молекулярной мишенью.***

*Индикатор достижения компетенции: ПК-П1.3 Использует сведения о механизме действия лекарственных препаратов для анализа взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями.*

Уровень	Характеристика
Повышенный	Для анализа взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями использует сведения о механизме действия лекарственных препаратов в полном объеме.
Базовый	Для анализа взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями использует сведения о механизме действия лекарственных препаратов в полном объеме, но допускает неточности

	при интерпретации.
Пороговый	Для анализа взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями использует сведения о механизме действия лекарственных препаратов не в полном объеме, неточности при интерпретации исправляет с помощью преподавателя.
Ниже порогового	Не способен использовать сведения о механизме действия лекарственных препаратов для анализа взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями.

*Индикатор достижения компетенции: ПК-П1.4 Анализирует механизм взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями.*

Уровень	Характеристика
Повышенный	Выполняет достоверный анализ взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями.
Базовый	Проводит анализ взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями, используя сведения о механизме действия лекарственных препаратов, допущенные несоответствия определяет самостоятельно.
Пороговый	Демонстрирует структурированные знания о молекулярных основах действия лекарств, выполняет не полный анализ взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями.
Ниже порогового	Не демонстрирует структурированные знания о молекулярных основах действия лекарств.

**Компетенция: ПК-П2 Способен проводить научные исследования по определению связи структуры и активности органических веществ с заданной биологической активностью.**

*Индикатор достижения компетенции: ПК-П2.3 Использует данные компьютерного моделирования для установления связи структуры и биологической активности.*

Уровень	Характеристика
Повышенный	Способен предложить и обосновать структурные модификации биологически активной молекулы с целью улучшения фармакологических свойств с высокой точностью и достоверностью.
Базовый	Способен предложить и обосновать структурные модификации биологически активной молекулы с целью улучшения фармакологических свойств с степенью достоверности более 75 %.
Пороговый	При обосновании структурных модификаций биологически активной молекулы с целью улучшения фармакологических свойств допускает ошибочные предположения, исправляет с помощью преподавателя.
Ниже порогового	Не демонстрирует способности предложить и обосновать структурные модификации биологически активной молекулы с целью улучшения фармакологических свойств.

**Компетенция: ПК-П3 Способен выдвигать концепции направленной структурной модификации соединения-лидера, опираясь на информацию о его строении и действия на молекулярную мишень.**

*Индикатор достижения компетенции: ПК-П3.1 Использует базовые принципы дизайна структур биологически активных веществ для направленной модификации соединений-лидеров.*

Уровень	Характеристика
Повышенный	Демонстрирует структурированные знания о принципах дизайна

	лекарств и связи между их структурой и активностью в полном объеме.
Базовый	Демонстрирует структурированные знания о принципах дизайна лекарств и связи между их структурой и активностью не в полном объеме, но не допускает неточностей при использовании.
Пороговый	Демонстрирует отдельные знания о принципах дизайна лекарств и связи между их структурой и активностью, не представляет полной взаимосвязи.
Ниже порогового	Не демонстрирует структурированные знания о принципах дизайна лекарств и связи между их структурой и активностью.

*Индикатор достижения компетенции: ПК-П3.2 Применяет на практике принципы конструирования и оптимизации структур веществ с заранее заданной биологической активностью.*

Уровень	Характеристика
Повышенный	
Базовый	
Пороговый	
Ниже порогового	

## 2. Контрольные мероприятия по дисциплине

Вид контроля	Форма контроля/Оценочное средство
Текущий контроль	Собеседование Кейс-задача Контрольная работа
Промежуточная аттестация	Экзамен

№ п/п	Наименование раздела	Контролируемые ИДК	Вид контроля/используемые оценочные средства	
			Текущий	Пром. аттестация
Раздел 1	Введение, предмет и задачи медицинской химии.	ПК-П1.3 Использует сведения о механизме действия лекарственных препаратов для анализа взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями ПК-П1.4 Анализирует механизм взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями	Собеседование	Экзамен
Раздел 2	Биологические мишени действия лекарств.	ПК-П1.3 Использует сведения о механизме действия лекарственных препаратов для анализа взаимодействия биологически активных веществ	Собеседование Контрольная работа	Экзамен

		с молекулярными мишенями ПК-П1.4 Анализирует механизм взаимодействия биологически активных веществ с молекулярными мишенями		
Раздел 3	Этапы и методы создания лекарственного вещества.	ПК-П2.3 Использует данные компьютерного моделирования для установления связи структуры и биологической активности ПК-П3.1 Использует базовые принципы дизайна структур биологически активных веществ для направленной модификации соединений-лидеров ПК-П3.2 Применяет на практике принципы конструирования и оптимизации структур веществ с заранее заданной биологической активностью	Собеседование Кейс-задача Контрольная работа	Экзамен

### 3. Оценочные материалы текущего контроля

*Очная форма обучения*

**Раздел 1. Введение, предмет и задачи медицинской химии.**

*Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Введение в предмет, основные понятия. Этапы создания лекарства":

1. В чем состоят основные задачи ранней разработки лекарств?
2. Чем определяется биологическая активность веществ?
3. Какие пути поиска лекарств применялись исторически?
4. Что такое лекарственное вещество?
5. Что такое лекарственное средство?
6. Что такое лекарственный препарат?
7. Какие основные требования применяются к лекарственному веществу?
8. Чем заканчивается успешный путь создания лекарства.
9. В чем отличие медицинской химии от фармацевтической и биохимии?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не

зачтено" - менее 60 %.

**Раздел 2. Биологические мишени действия лекарств.**

*Тема 2.1. Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Основные классы биоорганических соединений. Белковые мишени, ферменты, ферментативная кинетика и типы ингибирования":

1. В чем различие рецептора и фермента как терапевтической мишени?
2. Что такое каталитическая триада гидролаз?
3. На чем основан дизайн конкурентных ингибиторов?
4. На чем основан дизайн ковалентных ингибиторов?
5. Как различить конкурентный и неконкурентный тип ингибирования?
6. Как различить ковалентный и нековалентный тип ингибирования?
7. Почему нуклеиновые кислоты – особенная мишень?
8. Как работает сигнальный каскад в клетке?
9. К какому семейству относится адренорецептор?
10. Каковы два основных варианта развития сигнального каскада GPCR?
11. К какому семейству относится рецептор эпидермального фактора роста?
12. Что является конечной точкой приложения сигнального пути рецепторов стероидных гормонов?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

*Тема 2.2. Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Рецепторы, классификация, типы взаимодействия. Ионные каналы. Методы оценки взаимодействия рецептора с лигандом":

1. В чем различие рецептора и фермента как терапевтической мишени?
2. Что такое каталитическая триада гидролаз?
3. На чем основан дизайн конкурентных ингибиторов?
4. На чем основан дизайн ковалентных ингибиторов?
5. Как различить конкурентный и неконкурентный тип ингибирования?
6. Как различить ковалентный и нековалентный тип ингибирования?

7. Почему нуклеиновые кислоты – особенная мишень?
8. Как работает сигнальный каскад в клетке?
9. К какому семейству относится адренорецептор?
10. Каковы два основных варианта развития сигнального каскада GPCR?
11. К какому семейству относится рецептор эпидермального фактора роста?
12. Что является конечной точкой приложения сигнального пути рецепторов стероидных гормонов?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

### *Тема 2.3. Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Основные рецепторные семейства, сигнальные каскады":

1. В чем различие рецептора и фермента как терапевтической мишени?
2. Что такое каталитическая триада гидролаз?
3. На чем основан дизайн конкурентных ингибиторов?
4. На чем основан дизайн ковалентных ингибиторов?
5. Как различить конкурентный и неконкурентный тип ингибирования?
6. Как различить ковалентный и нековалентный тип ингибирования?
7. Почему нуклеиновые кислоты – особенная мишень?
8. Как работает сигнальный каскад в клетке?
9. К какому семейству относится адренорецептор?
10. Каковы два основных варианта развития сигнального каскада GPCR?
11. К какому семейству относится рецептор эпидермального фактора роста?
12. Что является конечной точкой приложения сигнального пути рецепторов стероидных гормонов?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

### *Тема 2.4. Неферментативные и нерцепторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Неферментативные и нерцепторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Неферментативные и нерцепторные мишени. Нуклеиновые кислоты как мишени":

1. В чем различие рецептора и фермента как терапевтической мишени?
2. Что такое каталитическая триада гидролаз?
3. На чем основан дизайн конкурентных ингибиторов?
4. На чем основан дизайн ковалентных ингибиторов?
5. Как различить конкурентный и неконкурентный тип ингибирования?
6. Как различить ковалентный и нековалентный тип ингибирования?
7. Почему нуклеиновые кислоты – особенная мишень?
8. Как работает сигнальный каскад в клетке?
9. К какому семейству относится адренорецептор?
10. Каковы два основных варианта развития сигнального каскада GPCR?
11. К какому семейству относится рецептор эпидермального фактора роста?
12. Что является конечной точкой приложения сигнального пути рецепторов стероидных гормонов?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия. Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

#### Тема 2.5. Биологические мишени действия лекарств.

Форма контроля/оценочное средство: Контрольная работа

Вопросы/Задания:

1. Подготовить письменный и устный ответ на вопросы билета, составленного из списка вопросов.

Контрольная работа 1 содержит 2 теоретических вопроса (категории 1 и 2) по соответствующему разделу дисциплины.

Список теоретических вопросов контрольной работы 1:

Вопросы категории 1:

1. Понятие мишени для лекарственного вещества. Виды, примеры.
2. Ферментативные мишени, механизм действия гидролаз, кинетические исследования.
3. Дизайн ингибиторов ферментов. Типы ингибирования, кинетические исследования.
4. Рецепторные мишени. Понятие о сигнальном каскаде.
5. Дизайн антагонистов рецепторов, типы антагонистов.
6. Дизайн агонистов рецепторов, типы агонистов.
7. Фармакологическое воздействие на нуклеиновые кислоты. Особенности и ограничения.

Вопросы категории 2:

1. Ион-канальные системы, примеры, регуляция.
2. Рецепторы семейства GPCR, структура и механизм функционирования. Аденилат-циклазный сигнальный каскад.
3. Структура и механизм функционирования рецепторов семейства GPCR. Фосфолипидный каскад.
4. Рецепторные тирозинкиназы, структура и механизм функционирования, сигнальный каскад.
5. Структура и механизм функционирования рецепторов стероидных гормонов.

Написание контрольной работы отводится 2 часа. Защита контрольной работы проходит в устной форме с использованием письменного ответа студента. На защите студент кратко излагает основные тезисы, дает исчерпывающие ответы на замечания и вопросы.

Критерии оценивания контрольной работы:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- умение работать с предоставленными спектральными данными;

- грамотность и связность изложения материала;  
 - самостоятельность работы, наличие собственной обоснованной позиции.  
 Каждое из заданий билета оценивается по пятибалльной шкале. Оценка за контрольную работу рассчитывается как среднее арифметическое оценок за каждое из заданий билета в соответствии с критериями. Итоговая оценка за контрольную работу определяется путем обратного перевода:

Менее	3,0	баллов	–	оценка	«неудовлетворительно»;	
3,0	–	3,5	балла	–	оценка «удовлетворительно»;	
более	3,5	–	4,5	баллов	–	оценка «хорошо»;
более	4,5	–	5,00	баллов	–	оценка «отлично».

### **Раздел 3. Этапы и методы создания лекарственного вещества.**

*Тема 3.1. Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Понятие хита и лида. Источники хитов. Высокопроизводительный скрининг, QSAR, фармакофор":  
 Сколько времени занимает в среднем доклиническая разработка лекарства?

2. Когда применяется *de novo* дизайн?
3. Каковы необходимые стартовые условия для проведения структурно-ориентированного дизайна?
4. Какие группы чаще всего выступают донорами водородных связей в лекарствах?
5. В чем отличие жесткого и гибкого докинга?
6. Понятие о QSAR-моделировании.
7. Молекулярные скэффолды с точки зрения медицинской химии.
8. Понятие "лид-хоппинга", или трансформации структур соединений-лидеров.
9. Приведите примеры биоизостерных замен гидроксигруппы.
10. Приведите примеры биоизостерных замен карбоксигруппы.
11. Зачем в структуру вводят хиральные центры?
12. Какие дополнительные ограничения накладывает необходимость разработки лекарства, действующего на ЦНС?
13. Каковы стадии метаболической трансформации лекарства?
14. Какие фильтры применяются при виртуальном скрининге?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" – менее 60 %.

*Тема 3.2. Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Фармакокинетическая оптимизация лида (ADME свойства). Физико-химические свойства, всасывание, распределение":

Сколько времени занимает в среднем доклиническая разработка лекарства?

2. Когда применяется denovодизайн?

3. Каковы необходимые стартовые условия для проведения структурно-ориентированного дизайна?

4. Какие группы чаще всего выступают донорами водородных связей в лекарствах?

5. В чем отличие жесткого и гибкого докинга?

6. Понятие о QSAR-моделировании.

7. Молекулярные скэффолды с точки зрения медицинской химии.

8. Понятие "лид-хоппинга", или трансформации структур соединений-лидеров.

9. Приведите примеры биоизостерных замен гидроксигруппы.

10. Приведите примеры биоизостерных замен карбоксигруппы.

11. Зачем в структуру вводят хиральные центры?

12. Какие дополнительные ограничения накладывает необходимость разработки лекарства, действующего на ЦНС?

13. Каковы стадии метаболической трансформации лекарства?

14. Какие фильтры применяются при виртуальном скрининге?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;

- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60%.

### Тема 3.3. Метаболизм и экскреция.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Метаболизм и экскреция" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Метаболизм и экскреция":  
Сколько времени занимает в среднем доклиническая разработка лекарства?

2. Когда применяется denovодизайн?

3. Каковы необходимые стартовые условия для проведения структурно-ориентированного дизайна?

4. Какие группы чаще всего выступают донорами водородных связей в лекарствах?

5. В чем отличие жесткого и гибкого докинга?

6. Понятие о QSAR-моделировании.

7. Молекулярные скэффолды с точки зрения медицинской химии.

8. Понятие "лид-хоппинга", или трансформации структур соединений-лидеров.

9. Приведите примеры биоизостерных замен гидроксигруппы.

10. Приведите примеры биоизостерных замен карбоксигруппы.

11. Зачем в структуру вводят хиральные центры?

12. Какие дополнительные ограничения накладывает необходимость разработки лекарства,

действующего на ЦНС?  
13. Каковы стадии метаболической трансформации лекарства?  
14. Какие фильтры применяются при виртуальном скрининге?  
Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия. Критериями оценивания являются:  
- степень усвоения понятий и категорий по теме;  
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.  
Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

#### Тема 3.4. Биоизостерия.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Биоизостерия" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcru.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Биоизостерия":  
Сколько времени занимает в среднем доклиническая разработка лекарства?

2. Когда применяется denovодизайн?  
3. Каковы необходимые стартовые условия для проведения структурно-ориентированного дизайна?

4. Какие группы чаще всего выступают донорами водородных связей в лекарствах?

5. В чем отличие жесткого и гибкого докинга?

6. Понятие о QSAR-моделировании.

7. Молекулярные скэффолды с точки зрения медицинской химии.

8. Понятие "лид-хоппинга", или трансформации структур соединений-лидеров.

9. Приведите примеры биоизостерных замен гидроксигруппы.

10. Приведите примеры биоизостерных замен карбоксигруппы.

11. Зачем в структуру вводят хиральные центры?

12. Какие дополнительные ограничения накладывает необходимость разработки лекарства, действующего на ЦНС?

13. Каковы стадии метаболической трансформации лекарства?

14. Какие фильтры применяются при виртуальном скрининге?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия. Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;

- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

#### Тема 3.5. Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики.

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcru.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Смена хемотипа, пролекарства. Пептидомиметики":  
Сколько времени занимает в среднем доклиническая разработка лекарства?

2. Когда применяется denovодизайн?

3. Каковы необходимые стартовые условия для проведения структурно-ориентированного дизайна?

4. Какие группы чаще всего выступают донорами водородных связей в лекарствах?
  5. В чем отличие жесткого и гибкого докинга?
  6. Понятие о QSAR-моделировании.
  7. Молекулярные скэффолды с точки зрения медицинской химии.
  8. Понятие "лид-хоппинга", или трансформации структур соединений-лидеров.
  9. Приведите примеры биоизостерных замен гидроксигруппы.
  10. Приведите примеры биоизостерных замен карбоксигруппы.
  11. Зачем в структуру вводят хиральные центры?
  12. Какие дополнительные ограничения накладывает необходимость разработки лекарства, действующего на ЦНС?
  13. Каковы стадии метаболической трансформации лекарства?
  14. Какие фильтры применяются при виртуальном скрининге?
- Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия. Критериями оценивания являются:
- степень усвоения понятий и категорий по теме;
  - грамотность и связность изложения ответов на вопросы.
- Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

### *Тема 3.6. Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Структурные фрагменты, ассоциированные с токсичностью":

1. Сколько времени занимает в среднем доклиническая разработка лекарства?
2. Когда применяется *de novo* дизайн?
3. Каковы необходимые стартовые условия для проведения структурно-ориентированного дизайна?
4. Какие группы чаще всего выступают донорами водородных связей в лекарствах?
5. В чем отличие жесткого и гибкого докинга?
6. Понятие о QSAR-моделировании.
7. Молекулярные скэффолды с точки зрения медицинской химии.
8. Понятие "лид-хоппинга", или трансформации структур соединений-лидеров.
9. Приведите примеры биоизостерных замен гидроксигруппы.
10. Приведите примеры биоизостерных замен карбоксигруппы.
11. Зачем в структуру вводят хиральные центры?
12. Какие дополнительные ограничения накладывает необходимость разработки лекарства, действующего на ЦНС?
13. Каковы стадии метаболической трансформации лекарства?
14. Какие фильтры применяются при виртуальном скрининге?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

### *Тема 3.7. Современные методы и проблемы медицинской химии.*

Форма контроля/оценочное средство: Собеседование

Вопросы/Задания:

1. Ответить на вопросы преподавателя в ходе практического занятия.

Для оценки знаний по теме "Современные методы и проблемы медицинской химии" используется комплект заданий и вопросов, полнотекстовые версии которых размещены в эиос:

<http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=3492>.

Перечень примерных вопросов по теме "Современные методы и проблемы медицинской химии":

Сколько времени занимает в среднем доклиническая разработка лекарства?

2. Когда применяется *de novo* дизайн?

3. Каковы необходимые стартовые условия для проведения структурно-ориентированного дизайна?

4. Какие группы чаще всего выступают донорами водородных связей в лекарствах?

5. В чем отличие жесткого и гибкого докинга?

6. Понятие о QSAR-моделировании.

7. Молекулярные скэфолды с точки зрения медицинской химии.

8. Понятие "лид-хоппинга", или трансформации структур соединений-лидеров.

9. Приведите примеры биоизостерных замен гидроксигруппы.

10. Приведите примеры биоизостерных замен карбоксигруппы.

11. Зачем в структуру вводят хиральные центры?

12. Какие дополнительные ограничения накладывает необходимость разработки лекарства, действующего на ЦНС?

13. Каковы стадии метаболической трансформации лекарства?

14. Какие фильтры применяются при виртуальном скрининге?

Оценивание на практическом занятии проводится путем индивидуального устного опроса студентов по теме практического занятия.

Критериями оценивания являются:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;

- грамотность и связность изложения ответов на вопросы.

Оценка "зачтено" выставляется при освоении материала по теме 60% и более, оценка "не зачтено" - менее 60 %.

*Тема 3.8. Методы оптимизации структур соединений с учетом заданных свойств.*

Форма контроля/оценочное средство: Контрольная работа

Вопросы/Задания:

1. Подготовить письменный и устный ответ на вопросы билета, составленного из списка вопросов.

Контрольная работа 1 содержит 2 теоретических вопроса (категории 1 и 2) по соответствующему разделу дисциплины.

Список теоретических вопросов контрольной работы 2:..

Вопросы категории 1:

1. Путь создания лекарства от идеи до регистрации

2. Источники хитов. Виртуальный скрининг в разработке лекарств. Связь с методами комбинаторного синтеза и биологического скрининга.

3. Базы данных химической и биологической информации, примеры, особенности, проблемные аспекты.

4. Построение фармакофорных моделей, применение в скрининге.

5. Методы моделирования взаимодействия лигандов и рецепторов.

6. Понятие о QSAR-моделировании, 2D, 3D.

7. Молекулярные скэфолды с точки зрения медицинской химии.

Вопросы категории 2:

1. Понятие "лид-хоппинга", смена ядра в структуре соединений-лидеров.

2. Биоизостеризм. Классические биоизостерные замены.

3. Биоизостеризм. Неклассические биоизостерные замены.

4. Методы ригидификации и деригидификации структур веществ.
5. Хит-ту-лидоптимизация, принципы получения валидированных соединений-лидеров.
6. Ключевые ADME-параметры, подлежащие оценке и оптимизации на ранних этапах разработки лекарств.
7. Метаболизм лекарств, роль в дизайне.
8. Токсичность лекарств, оптимизация соединений для повышения безопасности.

На написание контрольной работы отводится 2 часа. Защита контрольной работы проходит в устной форме с использованием письменного ответа студента. На защите студент кратко излагает основные тезисы, дает исчерпывающие ответы на замечания и вопросы. Критерии оценивания контрольной работы:

- степень усвоения понятий и категорий по теме;
- умение работать с предоставленными спектральными данными;
- грамотность и связность изложения материала;
- самостоятельность работы, наличие собственной обоснованной позиции.

Каждое из заданий билета оценивается по пятибалльной шкале. Оценка за контрольную работу рассчитывается как среднее арифметическое оценок за каждое из заданий билета в соответствии с критериями. Итоговая оценка за контрольную работу определяется путем обратного перевода:

Менее	3,0	баллов	–	оценка	«неудовлетворительно»;	
3,0	–	3,5	балла	–	оценка «удовлетворительно»;	
более	3,5	–	4,5	баллов	–	оценка «хорошо»;
более	4,5	–	5,00	баллов	–	оценка «отлично».

### Тема 3.9. Медико-химический анализ связи структуры и активности соединений.

Форма контроля/оценочное средство: Кейс-задача

Вопросы/Задания:

1. Для предложенной из списка структуры выполните задания в письменном виде.

Выполняется студентом индивидуально в ходе практического занятия. Необходимо последовательно выполнить:

1. указать фармакологический класс,
2. охарактеризовать мишень, молекулярный механизм,
3. определить фрагменты, которые могут участвовать в связывании с мишенью, и типы связи. Какие возможны метаболиты? Как сказывается изменение структуры на фармакологических свойствах?

Список кейс-задач (ситуационных задач):

## 4. Оценочные материалы промежуточной аттестации

Третий семестр, Экзамен

Вопросы/Задания:

1. Подготовить письменный ответ на вопросы билета и ответить на уточняющие устные вопросы преподавателя.

Билет включает в себя задачу и 2 теоретических вопроса, направленных на формирование компетенций УК-6, ПК-1, ПК-2 и ПК-3.

1. Вопрос категории 1 представляет собой теоретический вопрос о молекулярных основах действия лекарств.
2. Вопрос категории 2 представляет собой теоретический вопрос о принципах дизайна лекарств и связи между их структурой и активностью.
3. Задача категории 3 представляет собой задание по обоснованию структурных модификаций биологически активной молекулы с целью улучшения ее фармакологических свойств.

Перечень вопросов экзамена, структурированный по проверяемым категориям, представлен в таблице 4.

## Таблица 4

### Категория    Формулировка вопроса

#### Вопросы категории 1

Биомишень для действия лекарства. Общие понятия. Примеры.

Ферменты как биомишени. Особенности действия.

Принципы дизайна антагонистов ферментов. Типы антагонистов.

Рецепторы как биомишени. Особенности действия.

Принципы дизайна антагонистов рецепторов. Типы антагонистов.

Принципы дизайна агонистов рецепторов. Типы агонистов.

Нуклеиновые кислоты как биомишени. Особенности и ограничения.

Структура и механизм функционирования ион-канальной рецепторной системы.

Структура и механизм функционирования рецепторов семейства GPCR. Аденилат-циклазный каскад.

Структура и механизм функционирования рецепторов семейства GPCR. Липазный каскад.

Структура и механизм функционирования рецепторных тирозинкиназ.

Структура и механизм функционирования рецепторов стероидных гормонов

#### Вопросы категории 2

Этапы создания лекарства от идеи до регистрации

Виртуальный скрининг в разработке лекарств. Ключевые методы и подходы. Связь с методами комбинаторного синтеза и биологического скрининга.

Базы данных химической и биологической информации, примеры, особенности, проблемные аспекты.

Построение фармакофорных моделей.

Моделирование взаимодействия лигандов и рецепторов.

Понятие о QSAR-моделировании.

Молекулярные скэффолды с точки зрения медицинской химии.

Понятие "лид-хоппинга", или трансформации структур соединений-лидеров.

Классические биоизостерные замены.

Неклассические биоизостерные замены.

Методы ригидификации и деригидификации молекулярных скэффолдов.

Принципы оптимизации первоначальных соединений-хитов в валидированные соединения-лидеры ("хит-ту-лид" оптимизация).

Ключевые ADME-параметры, подлежащие оценке и оптимизации на ранних этапах разработки лекарств.

Метаболизм лекарств, роль и применение в дизайне соединений.

Токсичность лекарств, методы ее оценки и дизайна соединений с оптимизированным профилем токсичности.

#### Задачи категории 3

Для нижеприведенной структуры предположите фармакологический класс, охарактеризуйте мишень, молекулярный механизм. Определите фрагменты, которые могут участвовать в связывании с мишенью, и типы связи. Какие возможны метаболиты?

Как изменится фармакокинетика у О-миристинового эфира?

Как можно снизить токсичность со стороны ЦНС?

Как изменится активность у пара-изомера?

Как повлияет на эффекты со стороны ЦНС модификация  $\text{CH}_2\text{OH}$  в  $\text{COOH}$ ?

Что произойдет с активностью у оптического изомера?

Что произойдет с активностью у оптического изомера?

Предложите пролекарства, которые увеличат стабильность и биодоступность вещества

Какие изменения в активности можно ожидать при насыщении ацильного остатка?

Какие изменения в активности можно ожидать при замене фенольных гидроксиллов на атомы хлора?

Какие изменения в активности можно ожидать при ацилировании данного соединения глицином?

У какого метаболита активность выше, чем у исходного соединения?

Как может измениться биодоступность препарата у О-валильного производного?

Каждое из заданий билета оценивается по пятибалльной шкале. Оценка за контрольную работу рассчитывается как среднее арифметическое оценок за каждое из заданий билета в соответствии с критериями. Итоговая оценка за контрольную работу определяется путем обратного перевода:

Менее 3,0 баллов – оценка «неудовлетворительно»;

3,0 – 3,5 балла – оценка «удовлетворительно»;

более 3,5 – 4,5 баллов – оценка «хорошо»;

более 4,5 – 5,00 баллов – оценка «отлично».