



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

**ПЯТИГОРСКИЙ МЕДИКО-ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ -  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
МЕДИЦИНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
Министерства здравоохранения Российской Федерации**

**УТВЕРЖДАЮ**

Зам. директора института по УВР

\_\_\_\_\_ д.м.н. И.П. Кодониди

« 31 » августа 2023 г.

*Рабочая программа дисциплины*

**Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ**  
Для специальности: *33.05.01 Фармация(уровень специалитета)*

**Квалификация выпускника:** *провизор*  
Кафедра *органической химии*

Курс – **4**  
Семестр - **VII**  
Форма обучения – **очная**  
Лекции – **18 часов**  
Практические занятия – **52 часа**  
Самостоятельная работа – **38 часов**  
Промежуточная аттестация: *зачет*– **VII**  
**семестр**  
Трудоемкость дисциплины: **3 ЗЕ (108 часов)**

Пятигорск, 2023



Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации

*Рабочая программа дисциплины «Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ» составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по специальности «Фармация» (уровень специалитета) (утвер. Приказом Министерства образования и науки РФ от 27 марта 2018 г. № 219)*

Разработчики программы: зав. каф., профессор, д.ф.н. Э.Т. Оганесян, профессор каф. органической химии, д.ф.н. И.П. Кодониди, доцент каф. органической химии, к.х.н. Л.И. Бутенко.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры органической химии. протокол № 1 от «29 » августа 2023г.

Рабочая программа согласована с учебно-методической комиссией по циклу естественно-научных дисциплин протокол № от «31 » августа 2023 г.

Рабочая программа согласована с библиотекой  
Заведующая библиотекой Глущенко Л.Ф.

Внешняя рецензия дана зам. директора по лечебной работе ФГБУ ПГНИИК ФМБА России **д. м. н. Кайсиновой А.С.**

Декан факультета ВО Дьякова И.Н.

Рабочая программа утверждена на заседании Центральной методической комиссии протокол № 1 от «31» августа 2023 г.

Рабочая программа утверждена на заседании Ученого совета протокол № 1 от «31» августа 2023 г.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

**1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ). ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ).**

1.1. Основная цель предмета «Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ» состоит в формировании у студентов целостного представления о процессе создания лекарств – от момента выдвижения идеи синтеза веществ определенного строения, проведения скрининга и усовершенствования структуры до стадии клинических испытаний и организации производства. Выработать умения и навыки- способствующие формированию мышления для решения задач по модификации существующих и поиску новых лекарственных средств и обеспечить теоретическую базу для последующего изучения дисциплин по специальности «Фармация».

1.2. Задачи дисциплины:

Задачи «Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ»

- обеспечить усвоение знаний по вопросам изучения биологической активности веществ в зависимости от их пространственного строения, поляризации и метаболизма;
- углубленное изучение механизмов действия биологически активных соединений (БАС) на макроорганизм, на основе современных концепций медицинской химии и структурной фармакологии;
- изучение принципов поиска и создания новых биологически активных веществ путем прогнозирования их возможного действия на биологические мишени и превращения в организме;
- выработать у студентов способность использовать знания, умения и навыки, эффективного формирования профессиональных способностей провизора, оценки информативности результатов современной медицинской химии, успешного участия в создании проектов по разработке новых лекарственных средств.

**2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО**

Б1.Б13 базовая часть

**2.1 Перечень дисциплин и/или практик, усвоение которых необходимо для изучения дисциплины**

- 2.1.1 Б1.О.20 Органическая химия
- 2.1.2 Б1.О.11 Аналитическая химия
- 2.1.3 Б1.О.02 Биология
- 2.1.4 Б1.О.30 Фармацевтическая химия;
- 2.1.5 Б1.О.29 Фармацевтическая технология
- 2.1.6 Б1.О.26 Фармакогнозия

**2.2 Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:**

- Б1.О.27 Фармакология, клиническая фармакология с основами фармакотерапии
- Б1.О.24 Токсикологическая химия;



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

<b>В результате освоения дисциплины обучающийся должен:</b>	
<b>3.1</b>	<b>Знать:</b>
3.1.1	терминологию, основные этапы и отраслевые стандарты разработки медицинской продукции;
3.1.2	принципы и подходы планирования и осуществления органического синтеза БАС;
3.1.3	сведения о молекулярных механизмах действия лекарственных средств на биологические мишени макро- и микроорганизмов.
3.1.4	методы и инструменты вычислительного анализа для выявления количественных соотношений структура-активность (QSAR);
3.1.5	основные подходы планирования и проведения научных программ поиска и разработки медицинской продукции, основы управления проектом
<b>3.2</b>	<b>Уметь:</b>
3.2.1	проводить сбор и анализ научных публикаций, информации специализированных баз данных и подготовку соответствующих аналитических заключений по органическому синтезу и скринингу целевых продуктов;
3.2.2	оценивать и осуществлять анализ научных данных для целей химического и фармакологического скрининга;
3.2.3	осуществлять необходимые расчеты, вычисления и построение моделей с использованием специализированных аналитических инструментов и методов вычислительной и медицинской химии;
3.2.4	проводить подготовку обоснований, технических заданий для поставщиков услуг по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу
3.2.5	контролировать ход и результаты осуществления проект по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу.
<b>3.3</b>	<b>Иметь навык (опыт деятельности):</b>
3.3.1	отбор и систематизации информации подготовки обзоров и обновления научной
3.3.2	использования технических средств, для решения практических задач с использованием современного химического оборудования и компьютеризованных приборов;
3.3.3	молекулярного моделирования структур биологически активных соединений
3.3.4	критического осмысления лидеров с использованием логико-структурного подхода, а также
3.3.5	достоверно проводить корреляционный анализ и верно интерпретировать результаты
3.3.6	статистической обработки результатов проведенных исследований.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

### 3.1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы и индикаторами их достижения

Результаты освоения ОП (компетенции)	Индикаторы достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине			Уровень освоения		
		Знать	Уметь	Иметь навык (опыт деятельности)	Ознакомительный	Репродуктивный	Продуктивный
<b>ОПК-1.</b> Способен использовать основные биологические, физико-химические, химические, математические методы для разработки биологически активных соединений (БАС).	ИД <sub>ОПК-1.-1</sub> Применяет основные методы анализа и конструирования для разработки, исследований и экспертизы БАС и лекарственных средств	- терминологию, основные этапы и отраслевые стандарты разработки медицинской продукции (3.1.1) - принципы и подходы планирования и осуществления органического синтеза БАС (3.1.2) - основные подходы планирования и проведения научных программ поиска и разработки	- проводить отбор и анализ научных публикаций, информации специализированных баз данных и подготовку соответствующих аналитических заключений по органическому синтезу и скринингу целевых продуктов (3.2.1) оценивать и осуществлять анализ	- отбора и систематизации информации подготовки обзоров и обновления научной литературы, мониторинга новейших химических и фармацевтических разработок ведущих стран мира (3.3.1) - использования технических средств, для решения практических задач с использованием современного химического оборудования и	+	+	+



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
 филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
 учреждения высшего образования  
 «Волгоградский государственный медицинский университет»  
 Министерства здравоохранения  
 Российской Федерации**

		<p>медицинской продукции, основы управления проектом (3.1.5)</p>	<p>научных данных для целей химического и фармакологического скрининга (3.2.2)          - осуществлять необходимые расчеты, вычисления и построение моделей с использованием специализированных аналитических инструментов и методов медицинской химии (3.2.3)          проводить подготовку обоснований, технических заданий для поставщиков услуг по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу (3.2.4)          контролировать ход и результаты реализации проекта по химическому синтезу и/или</p>	<p>компьютеризованных приборов (3.3.2)          - молекулярного моделирования структур биологически активных соединений заданными фармакологическими свойствами и поиск путем конструирования соединений (3.3.3)          - критического осмысления лидеров с использованием логико-структурного подхода, а также программ различной направленности (3.3.4)          - достоверно проводить корреляционный анализ и верно интерпретировать результаты синтетических и фармакологических экспериментальных исследований (3.3.5)</p>			
--	--	--	--	--	--	--	--



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
 филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
 учреждения высшего образования  
 «Волгоградский государственный медицинский университет»  
 Министерства здравоохранения  
 Российской Федерации**

			фармакологическому скринингу (3.2.5)	статистической обработки результатов проведенных исследований (3.3.6)			
ИД <sub>ОПК-1</sub> -2Проводит сравнительный анализ механизмов фармакологической активности, планировать синтез прогнозируемых структур и модификацию эндогенных и лекарственных средств.	- принципы и подходы планирования и осуществления органического синтеза БАС (3.1.2) - сведения о молекулярных механизмах действия лекарственных средств на биологические мишени макро- и микроорганизмов (3.1.3)	- проводить сбор и анализ научных публикаций, информации специализированных баз данных и подготовку соответствующих аналитических заключений по органическому синтезу и скринингу целевых продуктов (3.2.1) оценивать и осуществлять анализ научных данных для целей химического и фармакологического скрининга (3.2.2) - осуществлять необходимые расчеты,	- отбора и систематизации информации подготовки обзоров и обновления научной литературы, мониторинга новейших химических и фармацевтических разработок ведущих стран мира (3.3.1) - использования технических средств, для решения практических задач с использованием современного химического оборудования и компьютеризованных приборов (3.3.2) - молекулярного моделирования структур биологически активных соединений	+	+	+	



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
 филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
 учреждения высшего образования  
 «Волгоградский государственный медицинский университет»  
 Министерства здравоохранения  
 Российской Федерации**

			<p>вычисления и построение моделей с использованием специализированных аналитических инструментов и методов вычислительной и медицинской химии (3.2.3)</p> <p>проводить подготовку обоснований, технических заданий для поставщиков услуг по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу (3.2.4)</p> <p>контролировать ход и результаты осуществления проект по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу (3.2.5)</p>	<p>заданными фармакологическими свойствами и поиск путем конструирования соединений (3.3.3)</p> <p>- критического осмысления лидеров с использованием логико-структурного подхода, а также программ различной направленности (3.3.4)</p> <p>- достоверно проводить корреляционный анализ и верно интерпретировать результаты синтетических и фармакологических экспериментальных исследований (3.3.5)</p> <p>статистической обработки результатов проведенных исследований (3.3.6)</p>			
--	--	--	---	--	--	--	--





**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

	<p>ИДопк-1.-3Определять лекарствоподобие и фармакокинетические параметры моделируемых веществ. Оформлять результаты исследований, проводит статистическую обработку результатов. Формулировать цели и задачи исследования. Планировать <i>insilico</i> эксперимент посредством компьютерные программ, основанных на представлениях молекул в 2D и 3D измерениях, а также на методе молекулярного докинга.</p>	<p>- терминологию, основные этапы и отраслевые стандарты разработки медицинской продукции (3.1.1) - принципы и подходы планирования и осуществления органического синтеза БАС (3.1.2) - сведения о молекулярных механизмах действия лекарственных средств на биологические мишени макро- и микроорганизмов (3.1.3) методы и инструменты вычислительного анализа для выявления количественных соотношений структура-активность (QSAR) (3.1.4) - основные подходы</p>	<p>- проводить сбор и анализ научных публикаций, информации специализированных баз данных и подготовку соответствующих аналитических заключений по органическому синтезу и скринингу целевых продуктов (3.2.1) оценивать и осуществлять анализ научных данных для целей химического и фармакологического скрининга (3.2.2) - осуществлять необходимые расчеты, вычисления и построение моделей с использованием специализированных аналитических</p>	<p>- отбора и систематизации информации подготовки обзоров и обновления научной литературы, мониторинга новейших химических и фармацевтических разработок ведущих стран мира (3.3.1) - использования технических средств, для решения практических задач с использованием современного химического оборудования и компьютеризованных приборов (3.3.2) - молекулярного моделирования структур биологически активных соединений заданными фармакологическими свойствами и поиск путем конструирования соединений (3.3.3)</p>	+	+	+
--	---	---	--	--	---	---	---



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
 филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
 учреждения высшего образования  
 «Волгоградский государственный медицинский университет»  
 Министерства здравоохранения  
 Российской Федерации**

		<p>планирования и проведения научных программ поиска и разработки медицинской продукции, основы управления проектом (3.1.5)</p>	<p>инструментов и методов вычислительной и медицинской химии (3.2.3)          проводить подготовку обоснований, технических заданий для поставщиков услуг по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу (3.2.4)          контролировать ход и результаты осуществления проект по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу (3.2.5)</p>	<p>- критического осмысления лидеров с использованием логико-структурного подхода, а также программ различной направленности (3.3.4)          - достоверно проводить корреляционный анализ и верно интерпретировать результаты синтетических и фармакологических экспериментальных исследований (3.3.5)          статистической обработки результатов проведенных исследований (3.3.6)</p>			
--	--	---	---	--	--	--	--



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

#### **4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

##### **4.1. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ**

Виды учебной работы	Всего часов/ЗЕ	Семестр
		VII
<b>1. Контактная работа обучающихся с преподавателем</b>	<b>74,2</b>	<b>74,2</b>
Лекции	18	18
Практические (лабораторные) занятия	50	50
КААТ З/ КААТ Э	0,2	0,2
Контроль самостоятельной работы	4	4
Консультация	2	2
<b>2. Самостоятельная работа</b>	<b>33,8</b>	<b>33,8</b>
<b>Контроль</b>	<b>0,2</b>	<b>0,2</b>
<b>ИТОГО:</b>	108	108
Общая трудоемкость	3 ЗЕ	3

В условиях образовательного процесса с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий реализация учебных часов возможна.

##### **4.2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ**

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Часов	Компетенции	Литература
	<b>Раздел 1.</b> Введение в основы дизайна лекарств. Цели и задачи науки её связь с химическими и медико-биологическими дисциплинами. Этапы создания первичного арсенала лекарственных средств.	32	ОПК-1	Л1.1; Л1.2; Л1.3; Л1.4; Л1.5; Л2.1; Л2.2; Л2.3;
	<b>Раздел 2.</b> Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная	49	ОПК-1	Л1.1; Л1.2; Л1.3; Л1.4; Л1.5; Л2.1;



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

	зависимость строение – биоактивность. Принцип АРМЭТ и правила Липинского			Л2.2; Л2.3;
	<b>Раздел 3.</b> Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи. Программное сопровождение.	28	ОПК-1	Л1.1; Л1.2; Л1.3; Л1.4; Л1.5;
	Всего	108		

#### 4.3. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

п/п	Наименование раздела дисциплины базовой части ФГОС	Содержание раздела
1.	<b>Введение в основы дизайна лекарств. Цели и задачи науки её связь с химическими и медико-биологическим и дисциплинами. Этапы создания первичного арсенала лекарственных средств.</b>	<p>Направленную разработку новых лекарственных препаратов с заранее заданными свойствами называют драг-дизайном (drug – лекарство, design – проектирование, конструирование).</p> <p>Цели освоения дисциплины:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>создать теоретическую основу углубленного осмысления взаимосвязи структура-активность соединений для возможности виртуального проектирования новых биологически активных соединений с заданной фармакологической активностью.</i></li> <li>- <i>способствовать формированию мышления для решения задач по молекулярному конструированию новых лекарственных средств, а также модификации известных биологически активных структур.</i></li> </ul> <p>Задачи освоения дисциплины:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>изучение биологической активности веществ в зависимости от их разнообразных структурных параметров, необходимых для реализации ими определенного фармакологического действия.</i></li> <li>- <i>углубленное изучение механизмов действия БАС на белковые мишени макроорганизма;</i></li> <li>- <i>изучение принципов поиска и создания новых биологически активных веществ.</i></li> </ul> <p align="center">Основные понятия драг-дизайна — мишень и лекарство. Мишень — это</p>



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

биологическая макромолекула, связанная с определенной функцией, нарушение которой приводит к заболеванию. Чаще всего мишенями являются белки — рецепторы и ферменты.

В драг-дизайне, как и в большинстве других наукоемких областей, продолжает увеличиваться роль вычислительной техники. Следует сразу оговорить, что разработать новый лекарственный препарат, используя только компьютеры, невозможно. Основные преимущества, которые дают вычислительные методы в данном случае, — это сокращение времени выпуска нового лекарства на рынок и снижение стоимости разработки.

Основные компьютерные методы, используемые в драг-дизайне, это, во-первых, предсказание пространственной структуры белка-мишени и механизма его взаимодействия с лекарством; во-вторых, виртуальный скрининг (компьютерное сканирование баз химических соединений); и наконец, оценка «похожести на лекарство» и других физико-химических характеристик.

Очень часто о трехмерной структуре белка-мишени разработчикам ничего не известно. В этом случае новые соединения конструируют, исходя из информации о структуре уже известных активных лигандов.

Общепринятая в биологии и химии парадигма гласит: «структура определяет свойства». Анализируя связи между структурой и свойствами известных соединений, можно предсказать химическую структуру новой молекулы, обладающей желаемыми свойствами. Этот подход используется и при модификации известных веществ с целью улучшения их свойств, и при поиске в химических библиотеках лигандов к определенному белку, и при составлении технических заданий фирмам, специализирующимся на таком направленном синтезе.

Очевидно, что драг-дизайн — это будущее фармакологической промышленности. По мере развития геномики, а также протеомики количество потенциальных мишеней должно увеличиться во много раз. Например, мишенями для антимикробных и противовирусных препаратов являются белки патогенных бактерий и вирусов, которые также необходимо активно исследовать. Это дополнительно расширяет поле деятельности «охотников за лекарствами». Знание структуры белков позволит находить и синтезировать на заказ низкомолекулярные лиганды, специфически связывающиеся с определенными участками мишеней.

Направленное конструирование новых лекарственных препаратов уже сейчас стало важнейшей частью химических и медико-биологических наук.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

		<p>Ее развитие и активное применение позволить осуществить разработку новых лекарственных средств, которые будут оказывать эффективный фармакологический эффект с минимальным побочным действием.</p>
2.	<p><b>Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная зависимость строения – биоактивность. Принцип АРМЭТ и правила Липинского.</b></p>	<p>Большинство лекарственных веществ должно пройти фармакокинетическую фазу испытаний, которую можно обозначить как АРМЭТ-фазу. На первых двух стадиях изучают абсорбцию потенциального лекарственного вещества и его распределение в организме пациента. На третьем этапе фармакокинетических исследований метаболизма потенциального лекарственного вещества определяют прежде всего оптимальное соотношение липофильности и гидрофильности ПЛВ. Затем устанавливают время полужизни этого соединения в теле и кровотоке пациента. На четвёртом этапе устанавливаются пути выведения (экскреции) отработанного ПЛВ и его метаболитов из организма. На последней (пятой) ступени фармакокинетических исследований определяются все возможные виды токсичности</p> <p>Химическое и пространственное строение вещества определяет наличие у него биоактивности. Однако ее уровень (эффективность действия) может в значительной степени зависеть от разнообразных факторов. Большинство лекарственных веществ должно обладать хорошей водорастворимостью, так как они переносятся в организме главным образом кровяным током. что благоприятствует созданию концентрации, достаточной для проявления фармакологического действия. Многие лекарственные вещества должны иметь хорошую липофильность и обладать способностью проникать через клеточные полупроницаемые мембраны, чтобы влиять на биохимические процессы метаболизма. Препараты, действующие на центральную нервную систему, должны свободно переходить из крови в спинномозговую жидкость и мозг, т.е. преодолевать гематоэнцефалический барьер, который защищает мозг от проникновения в него чужеродных веществ, растворенных в крови. Другим барьером для проникновения лекарственных веществ из крови к тканям органа-мишени являются стенки капилляров. Для большинства лекарственных веществ не очень высокой молекулярной массы.</p> <p><i>На биологическую активность лекарств, как правило, влияют следующие факторы:</i></p> <p>– физико-химические свойства (растворимость вещества в воде и жирах, ионизация вещества, коэффициенты распределения и др.);</p>



Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации

– химические параметры (электронная плотность в молекуле, типы химических связей, которые это вещество образует с рецептором);

– пространственные параметры (площадь молекулы, межатомные расстояния и стереохимические особенности).

Липинский и его коллеги поставили сообщество исследователей лекарственных средств перед фактом важности тщательного планирования и ограничения возможностей органического синтеза. Авторами было предложено так называемое «правило пяти» (впоследствии «правило Липински») для предсказательного определения фармакокинетических возможностей соединений. Эта работа появилась в результате анализа свойств значительного количества соединений, дошедших как минимум до клинической стадии испытаний. Оно действует для пероральных лекарственных средств, принимаемых чаще всего в виде таблеток.

Фармакокинетические исследования множества действующих в клинике ЛВ действительно показали, что в большинстве случаев пероральное введение потенциальных ЛВ будет эффективно (с вероятностью 90%), если предлагаемое в качестве лекарства вещество соответствует «правилу пяти» хотя бы по трём пунктам: 1) имеет молекулярную массу не более 500 (хотя, по другим данным это ограничение не существенно); 2) содержит в своей структуре суммарно не более 10 атомов азота и/или кислорода в качестве акцепторов Н-связи; 3) содержит не более пяти групп ОН и/или NH в качестве доноров Н-связи; 4) достаточно растворимо в воде (величина логарифма Р – коэффициента распределения между 1-октанолом и водой – не превышает 5); 5) не имеет слишком большой конформационной подвижности (не более десяти ротаторов – связей со свободным вращением).

В эти фармакокинетические «липофильные» правила пяти (пять пунктов и в каждом выделяется цифра пять или дважды по пять) не укладываются те соединения, которые могут транспортироваться через клеточные мембраны специальными эндогенными транспортными белками (активный транспорт).

Позднее были введены некоторые уточняющие поправки и дополнения (молекулярная масса может достигать любых значений если: а) общее число Н-доноров и Н-акцепторов не превышает 12; б) вещество содержит не более 10 ротаторов; в) площадь полярной поверхности молекулы соединения не превышает 120-140 квадратных ангстремов, чтобы быть достаточно



Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации

		липофильным для прохождения в кровь через пассивную стадию абсорбции в малом кишечнике).
3.	<b>Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи. Программное сопровождение.</b>	<p><b>Молекулярный докинг</b> — метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказывать наилучшее положение лиганда (обычно малой молекулы) относительно белка-мишени, используя их трехмерные структуры и оценочные функции энергии взаимодействия молекул.</p> <p>«Докинг» переводится с английского как «стыковка» — и в этом буквально заключается суть данного компьютерного эксперимента. Одна молекула фиксируется в пространстве (например, <i>рецептор</i>), а другая (<i>лиганд</i>) стыкуется к ней в определенной ориентации, и реалистичность результирующего комплекса оценивается с помощью специального алгоритма — <i>оценочной функции</i>. Затем ориентация лиганда и/или место стыковки на рецепторе меняется, и процедура повторяется. Программы для молекулярного докинга повторяют этот цикл от нескольких тысяч до нескольких десятков тысяч раз. Таким образом генерируется большой набор вариантов молекулярного комплекса, которые ранжируются по величине оценочной функции; варианты, имеющие низкую оценку, отсеиваются как нереалистичные. Обычно в результате получается несколько десятков или сотен моделей комплекса, имеющих наивысшие оценки. Очень часто задача исследователя сводится к тому, чтобы понять, какая из этих моделей отражает то, что происходит на молекулярном уровне в действительности, и здесь не обойтись без экспериментальных данных об этой (или максимально схожей с ней) молекулярной системе, а также глубоких знаний в области молекулярной биофизики.</p> <p>Когда активный сайт белка не известен, поиск сайт соединения и конформации лиганда называют "слепым докингом". Исследование при слепом докинге также ценно для поиска белок-белковых взаимодействий, когда обе макромолекулы, как предполагается, дополняют друг друга формой и межмолекулярными взаимодействиями.</p> <p>В случае известности активного сайта, ситуация становится более простой, и используется прямой докинг.</p> <p>Выделяют два основных метода докинга:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Жёсткий докинг (<i>rigiddocking</i>)</li><li>2. Гибкий докинг (<i>flexibledocking</i>)</li></ol> <p>Метод <b>жёсткого докинга</b> не учитывает конформационную подвижность как для рецептора, так и для лиганда. Таким образом, задача</p>





Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации

докинга сводится при использовании этих методов к нахождению оптимальной ориентации лиганда (в конкретной конформации) в сайте связывания рецептора. **Гибкий докинг** учитывает конформационную подвижность лиганда, но не учитывает конформационную подвижность молекулы рецептора. Подавляющее большинство современных программ докинга работают, основываясь именно на этом принципе. По сути своей гибкий докинг может быть сведён к автоматическому перебору конформаций и ориентаций лиганда в сайте связывания и оценке энергии взаимодействия.

Можно выделить самый лучший вариант осуществления докинга, так называемый **полностью гибкий докинг**. Наиболее перспективные, но и наиболее вычислительно сложные методы докинга позволяют учитывать конформационную подвижность не только лиганда, но и рецептора.

Ниже приводятся наиболее популярные программы для осуществления молекулярного докинга, в том числе рассмотренные выше, с адресом электронной страницы программного продукта:

1. *AutoDock* (<http://autodock.scripps.edu>)
2. *FlexX* (<http://www.biosolveit.de/FlexX/>)
3. *Dock* (<http://dock.compbio.ucsf.edu>)
4. *Surflex* (<http://www.biopharmics.com>, [www.tripos.com](http://www.tripos.com))
5. *Fred* (<http://www.eyesopen.com/products/applications/fred.html>)
6. *Gold* ([http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/life\\_sciences/gold/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/life_sciences/gold/))
7. *PLANTS* (<http://www.tcd.uni-konstanz.de/research/plants.php>)
8. *3DPL* (<http://www.chemnavigator.com/cnc/products/3dpl.asp>)
9. *Lead Finder* (<http://www.moltech.ru>)
10. *Molegro Virtual Docker* (<http://www.molegro.com>)

#### 4.4. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ЗАНЯТИЙ ЛЕКЦИОННОГО ТИПА

№	Темы занятий лекционного типа	Часы (академ.)
---	-------------------------------	----------------



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

1.1	Предмет и задачи основ дизайна и химии лекарственных средств. Введение в дисциплину. Этапы виртуального поиска потенциально биологически активной молекулы.	2
1.2	Изостеры и биоизостеры в конструировании новых лекарственных средств. Дизайн веществ с целью применения в комбинаторной химии.	2
1.3	Понятие фармакофора. Определение активной группы в рядах биологически активных веществ. Значение фармакокинетики для дизайна лекарственных веществ. Зависимость строение-биоактивность.	2
1.4	Протеомика. Классификация белковых макромишеней. Строение и функции.	2
1.5	Дизайн активных центров белковых макромишеней. Основы компьютерного дизайна ЛП виртуальной фармакодинамикой.	2
1.6	Молекулярное моделирование. Трехмерная модель молекулы, как базовый элемент моделирования.	2
1.7	Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи. Программное сопровождение.	2
1.8.	Молекулярная динамика. Принцип метода и его задачи. Программное сопровождение.	2
1.9.	Хемогенетика. Функциональная геномика. Типы взаимодействий лекарств с ДНК.	2

#### **4.5. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН КОНТАКТНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ НА ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЯХ**

№	Тематические блоки	Часы (академ.)
1.	Введение в основы дизайна лекарств. Цели и задачи науки её связь с химическими и медико-биологическими дисциплинами. Этапы создания первичного арсенала лекарственных средств.	3
2.	Хемоинформатика и её использование в методах молекулярного моделирования для создания ЛС. Компьютерные технологии (in silico), применение при прогнозировании фармакологических свойств химических соединений, исходя из 3D структур методом молекулярного докинга. Моделирование на основе структуры лиганда и белка.	3
3.	Понятие о биоизостеризме в поиске и усовершенствовании структур-лидеров и активных фармацевтических субстанций. Понятие о молекулярных дескрипторах, описывающих строение БАС.	3
4.	Комбинаторный синтез и его роль в поиске соединений-лидеров. Параллельный синтез индивидуальных соединений. Классические жидкофазные реакции, комбинаторный синтез на твердом носителе.	3



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

5.	Логико-структурный подход и использование эмпирических методов поиска ЛС. Современные методы молекулярного конструирования БАС посредством информационных технологий. Лекарствоподобие и прогноз фармакокинетических свойств химических веществ посредством онлайн баз данных БАС.	3
6.	Пролекарства. Принцип антиметаболитов в умозрительном дизайне ЛП. Эмпирические основы их дизайна.	3
7.	Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная зависимость строение – биоактивность. Принцип АРМЭТ и правила Липинского.	3
8.	Метод двухмерной (2D) и трёхмерной (3D) количественной зависимости «строение - биоактивность» в дизайне лекарственных препаратов	3
9.	Контрольная работа.	3
10.	Протеом. Функциональная протеомика. Структурная иерархия протеинов. Классификация белковых макробиомолекул. Строение, функции и активные центры ферментов. Антитела, их строение и функции. Активные зоны. Белковые рецепторы-мишени. Строение и функции.	3
11.	Дизайн активных центров белковых макромишеней. Распознавание белковыми мишенями лекарственного вещества. Механизмы взаимодействий лекарств с белковыми мишенями	3
12.	Основы компьютерного дизайна лекарственных препаратов виртуальной фармакодинамикой.	3
13.	Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи. Возможности применения данного метода компьютерного моделирования для прогнозирования биологической активности виртуальных соединений. Программное сопровождение.	3
14.	Молекулярная динамика. Принцип метода и его задачи. Возможности применения данного метода компьютерного моделирования для прогнозирования биологической активности виртуальных соединений. Программное сопровождение.	3
15.	Геномика. Постгеномный этап в создании новых лекарств. дизайн потенциального лекарственного вещества, взаимодействующего с ДНК-мишенью. Типы взаимодействий лекарств с ДНК.	3
16.	Контрольная работа	3
17.	УИРС	2
18.	Зачетное занятие	2

#### 4.6. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

№	Тема самостоятельной работы	Часы (академ.)
1.	Кислотно-основные свойства органических соединений. Теории Бренстеда и Льюиса. Типы органических кислот 1. (ОН, SH, NH, СН-	2



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

	кислоты) и оснований ( $\pi$ -основания, $n$ -основания).	
2.	Основы компьютерного молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов.	3
3.	Гетерофункциональные производные бензола – родоначальники лекарственных препаратов. Связь между строением и фармакологическим действием.	2
4.	Стероиды и их роль в биохимических процессах.	2
5.	Глюкоза как исходное вещество для получения сорбита, глюконата кальция, аскорбиновой кислоты. Физические и химические методы идентификации глюкозы и продуктов ее превращения.	2
6.	Белки - молекулы жизни: строение, биологическая роль, химические свойства, некоторые гормоны и антибиотики как производные пептидов.	3
7.	Явление таутомерии в органической химии: кето-енольная, лактим-лактаманная, цикло-оксотаутомерии. Причины. Особенности химических свойств разных таутомерных форм.	3
8.	Асимметрия биологических молекул.	3
9.	Современные представления о роли антиоксидантов.	2
10.	Пространственное строение и биологическая активность.	2
11.	Понятие о дескрипторах молекулярной структуры. Использование молекулярных дескрипторов в поиске биологически активных соединений.	2
12.	Лекарственные препараты на основе алкалоидов, их создание и применение в медицине.	3
13.	Представление об основных подходах к модификации соединения-лидера.	2
14.	Оптимизация структур соединений-лидеров для улучшения их фармакокинетических и фармакодинамических характеристик	2
15.	Количественные характеристики биологической активности.	2
16.	Наноплатформы для адресной доставки лекарств.	2
17.	Первичная модификация соединения-лидера. Биоизостерическая замена.	2
18.	Первичная модификация соединения-лидера. Гомологизация. Конформационное ограничение.	2
19.	Аминокислоты и лекарственные препараты на их основе и на основе пептидов. Пептидомиметики.	2
20.	Общая характеристика витаминов. Лекарственные препараты на их основе.	2
21.	Понятие о ферментах (принципы действия и регуляция их активности). Ингибиторы ферментов в современном арсенале лекарственных средств.	2
22.	Нуклеиновые кислоты как мишени для биологически активных веществ.	2,8



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

23.	Фармакокинетика (основные понятия и модели). Роль фармакокинетических исследований в создании новых лекарственных средств.	3
24.	Выбор стратегии исследований при создании новых лекарственных средств и критерии оценки качества структуры-лидера.	2
25.	Источники поиска новых лекарственных средств.	2
26.	Современные методы усовершенствования структуры лидера. Конформационные ограничения.	2
27.	Комбинаторный синтез и его роль в поиске структур-лидеров.	2
28.	Краткий исторический обзор, основные методологические понятия и количественные соотношения структура-активность.	3
29.	«Двойные лекарства», пролекарства и биопредшественники.	2
30.	Мишени действия лекарственных веществ в организме.	2
31.	Дескрипторы молекулярной структуры (молекулярный граф, топологические индексы, индексы, основанные на физико-химических и квантово-химических характеристиках).	2



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

Наименование разделов дисциплины (модулей)	Аудиторные занятия					Всего часов на аудиторную работу	Самостоятельная работа студента	КААТ 3/КААТ Э	Экзамен	Итого часов	Часы контактной работы обучающегося	Компетенции			Используемые образовательные технологии, способы и методы обучения, формы организации образовательной	Формы текущей и промежуточной аттестации
	лекции	семинары	лабораторные занятия (лабораторные работы, практикумы)	практические занятия, клинические занятия	курсовая работа							УК	ОПК	ПК		
<b>Модуль 1.</b> Введение в основы дизайна лекарств. Цели и задачи науки её связь с химическими и медико-биологическими дисциплинами. Этапы создания первичного арсенала лекарственных средств.	5	-	-	15			12		-				ОПК-1		Л, ПЛ, ЛВ, МГ, КС, Р, Д	Т, КР
<b>Модуль 2.</b> Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная зависимость строение – биоактивность. Принцип АРМЭТ и правила	9	-	-	23			17		-				ОПК-1		Л, ПЛ, ЛВ, МГ, УИРС	Т, КР



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

Липинского																	
<b>Модуль 3.</b> Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи. Программное сопровождение	4	-	-	14			9		-					ОПК-1		Л, ЛП, МГ, КС, УИРС, Д	Т, КР, Р
<b>Итого часов</b>	18	-	-	52			38	0,2	-								

#### 4.7. СВОДНЫЙ ПЛАН РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Образовательные технологии, способы и методы обучения: традиционная лекция (Л), лекция-визуализация (ЛВ), проблемная лекция (ПЛ), Тренинг (Т), дебаты (Д), метод малых групп (МГ), компьютерная симуляция (КС), учебно-исследовательская работа студента (УИРС), подготовка и защита рефератов (Р).

Формы текущей и промежуточной аттестации: Т – тестирование, КР – контрольная работа, Р – написание и защита реферата, С – собеседование по контрольным вопросам, Д – подготовка доклада и др.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
 филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
 учреждения высшего образования  
 «Волгоградский государственный медицинский университет»  
 Министерства здравоохранения  
 Российской Федерации**

## 5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### 5.1. Рекомендуемая литература

#### 5.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Количество
Л1.1	В. Г. Граник.	Основы медицинской химии.— ISBN 5-89522-167-X	М.: Вузовская книга, 2001.— 384 с.	
Л1.2	Зефирова, О.Н.	«Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ» (medicinalchemistry). II. Методологические основы создания лекарственных препаратов	Вестник Московского университета. Серия 2. Химия.— 2000.— Т. 41, № 2.— С. 103—108.	
Л1.3	А. Т. Солдатенков	Основы органической химии лекарственных веществ.	М.: Химия, 2001.— 192с.	
Л1.4	Patrick G. L.	Introduction to Medicinal Chemistry	London, 1995	
Л1.5	В. Д. Орлов,	Медицинская химия.	Харьков: Фолио, 2005.— 461с.— ISBN 966-03-3119-3	20

#### 5.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Количество
Л2.1	Nogrady T.	Medicinal chemistry: a biochemical approach	Medicinal Chemistry (2 <sup>nd</sup> ed.), 1988	5
Л2.2	Kubinyi H.	QSAR: Hansch Analysis and Related Approaches	Methods and Principles in Medicinal Chemistry, Vol.1), VCH, 1993	3





**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

Л2.3	Маршалл В.Дж.	«Клиническая биохимия»	"Бином. Лаборатория знаний"(2015), 408 с.	
<b>5.1.3. Методические разработки</b>				
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Кол-во
	-			
<b>5.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы</b>				
<b>5.2.1. Современные профессиональные базы данных</b>				
<b>5.2.2. Информационные справочные системы</b>				

## **6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

6.1	<b>Лекции</b> - эта разновидность обучения применяется для ознакомления студентов с новым учебным материалом и, что самое важное, объяснения трудноусваиваемых положений. На лекции выделяются наиболее значимые разделы темы, являющиеся базовыми для усвоения последующих тем и специальных дисциплин.
6.2	<b>Семинары</b> проводятся в разных формах, среди которых чаще всего используются: опрос, мини-лекция (для объяснения наиболее сложных разделов курса), дискуссия, коллективное решение творческих задач, консультация.
6.3	<b>Лабораторные работы</b> заключаются в выполнении химического эксперимента, обсуждении его результатов, сопоставлении собственных данных с теоретически прогнозируемыми. Выводы, сделанные студентами в конце работы, систематизируют изучаемый материал, что способствует его запоминанию.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

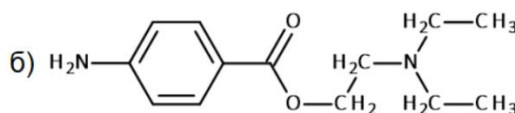
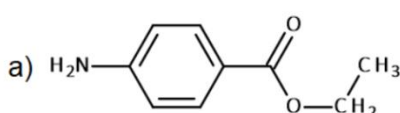
6.4	<b>Выполнение УИРС</b> - студентам предлагается с помощью спектральных характеристик и химическим путем идентифицировать предложенные вещества, доказать доброкачественность или подлинность некоторых органических соединений, применяемых в медицине.
6.5	<b>Индивидуальные задания по основному курсу</b> включают самостоятельное выполнение упражнений, задач, схем превращений по изучаемому материалу. Каждый вариант билета содержит 5-6 заданий.
6.6	<b>Индивидуальные задания по углубленному курсу</b> включают 30 карт, каждая из которых содержит 8-10 вопросов, касающихся строения, получения, химических свойств, спектральных характеристик органических веществ, являющихся лекарственными препаратами.
6.7	<b>Реферативные работы</b> используются для углубления знаний по отдельным наиболее актуальным и интересным темам курса. Рефераты, как правило, зачитываются и обсуждаются в группах, а наиболее удачные выдвигаются на студенческие научные конференции.
6.8	<b>Работа в СНО</b> адаптирует студентов к научной деятельности. Темы выполняемых работ соответствуют научной тематике кафедры, выполняются в лабораториях кафедры. Результатами работы являются научные статьи, доклады на научных конференциях различных уровней.

## **7. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **7.1. Вопросы и задания для текущего контроля успеваемости:**

#### **Пример билета контроля.**

1. Поясните термин «комбинаторный синтез» и укажите, основные направления его использования.
2. Аминазин – нейролептик из группы производных фенотиазина. Оказывает выраженное антипсихотическое, седативное, противорвотное действие. Напишите структурную формулу данного препарата. Приведите нумерацию атомов родоначальной структуры.
3. Предложите реакции комбинаторного синтеза, позволяющие снизить степень токсического действия аминазина (на примере реакций алкилирования с изопропилбромидом и ацилирования с ацетилхлоридом).
4. Назовите предложенные биоизостеры:



5. Проанализировав строение соединения б) предскажите его химические свойства. Ответ подтвердите уравнениями реакций (не менее четырех)
6. Предложите синтез соединения а) из зад. 1 из бензола.

#### **7.1.2. Пример домашнего задания:**

11. Дайте определение понятию «фармакофор».



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

2. На чем основано прогнозирование свойств химических соединений в хемоинформатике?
3. При проведении молекулярного докинга противопаркинсонических средств в отношении D2-рецепторов дофамина были получены следующие данные. Определите какое из соединений обладает более выраженным сродством к мишени.

Препарат	Энергия связывания ккал/моль
Бромкриптин	-50,3
Проноран	-20,7
Прамипексол	-55,6
Ропинирол	-62,7
Леводопа	-17,9

**Вопросы для текущего контроля - ОПК -1**

1. Приведите структурные формулы неклассических биоизостер:
- а) гамма-аминомасляная кислота б) изогувацин.
2. Перечислите принципы молекулярного конструирования противосудорожных средств.
3. Напишите формулу никотина – главного алкалоида табака. Приведите реакцию его взаимодействия с эквимольным количеством хлороводородной кислоты при комнатной температуре. Объясните, какой из 2-х атомов азота в его молекуле и почему обладает большей активностью в данной реакции.
4. Известно, что аденозин обладает противоаритмическим действием, а также в организме играет важную роль в биохимических процессах, таких как передача энергии (АТФ и АДФ) и сигналов. Напишите уравнение реакции образования данного нуклеозида из соответствующей нуклеиновой кислоты и моносахарида.
5. Приведите схему получения ноотропного препарата фенотропила путем алкилирования 4-фенил-2-пирролидона этилмонохлорацетатом и последующим амминированием образующегося эфира газообразным аммиаком.
6. Приведите формулы прокаина и его изостерапрокаинамида, к каким классическим или неклассическим биоизостерам они относятся.
7. Приведите схему образования 5-фторуридина (N-гликозида рибозы и 5-фторурацила), а затем его 3-монофосфата. Укажите, какой продукт является нуклеотидом, а какой – нуклеозидом. Дайте определения этим понятиям.
8. Синтез антиаритмикаэтмозина можно провести путем последовательных реакций из м-нитроанилина, напишите схему его получения.
9. Приведите формулы бензола, метилбензола, хлорбензола, тиофена, 2-метилтиофена и 2-хлортиофена. Какие из них являются биоизостерами?
10. Укажите преимущества и недостатки жидкофазного синтеза.
11. Цитарабин – пиримидиновый антиметаболит, аналог цитидина, оказывающий



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

противоопухолевое и иммунодепрессивное действие. Напишите структурную формулу данного препарата и укажите реакционные центры.

12. Можно синтезировать препарат антиаритмического действия этацизина путем последовательных реакций из м-нитроанилина, напишите схему его получения.

13. Приведите структурную формулу гамма-аминомасляной кислоты и ее биоизостеров.

14. Укажите, какие функциональные группы и в какой области ИК-спектра можно обнаружить для аминазина.

15. Предложите метод синтеза барбитала из мочевины и диэтилмалоновой кислоты. Какие виды таутомерии и почему характерны для этого препарата? Какой из таутомеров и почему используется для получения лекарственного препарата, лучше растворимого в воде, чем сам барбитал?

16. Напишите формулы, пронумеруйте атомы и назовите гетероциклы, которые лежат в основе:

а) тубазида;      б) фуразолидона;      в) фтивазида;      г) 5-НОК

17. Какие типы полимерных смол используются для комбинаторного синтеза?      ОПК-1

18. Укажите, какой вид таутомерии характерен для ксантина. Объясните причину существования таутомерных форм. Какие из них и почему будут реагировать с: а) NaOH, б) HCl? Приведите уравнения реакций.

19. Синтез antimicrobialного препарата сульфадиазина осуществляют путем последовательных реакций из N-ацетиламинобензолсульфохлорида. Приведите схему его образования.

20. Напишите уравнения реакций сульфирования, нитрования, бромирования с биоизостерами – никотинамидом и тиазолил-4-амидом.

21. Объясните, какая общая фармакопейная реакция используется для открытия алкалоидов группы пурина. Опишите ход выполнения этой реакции, укажите аналитический эффект. Как кофеин применяется в медицине?

22. Отнеся тиазол к  $\pi$ -избыточным,  $\pi$ -дефицитным или  $\pi$ -амфотерным системам (дайте определения этим понятиям), объясните, почему для него возможны реакции SN и подтвердите реакцией аминирования.

23. Приведите схему синтеза фуразолидона путем последовательных реакций из 2-гидразиноэтанола.

24. Приведите структурные формулы никотинамида и его биоизостера амидатиазол-5-карбоновой кислоты.

25. Объясните термин «сердечные гликозиды». Укажите, из каких структурных фрагментов они состоят и как это влияет на их свойства (физические и фармакологические). Приведите один пример, назовите вещество.

26. Промышленный способ синтеза antimicrobialного препарата пипразинамида, взаимодействием на первой стадии о фенилендиамида с глиоксалем. Приведите схему его



Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации

получения.

27. Биоизостерным аналогом п-аминобензойной кислоты является белый стрептоцид. Приведите формулы этих соединений, назовите их по заместительной номенклатуре.

28. Поясните термин «комбинаторный синтез» и укажите, в каких направлениях используется.

29. Предложите схемы получения тубазида и фтивазида. Укажите значение данных препаратов в медицине.

30. Синтез антиаритмиканикотинамида можно осуществить путем последовательных реакций из п-нитробензоилхлорида. Приведите схему получения никотинамида.

### Пример тестовых заданий

Проверяемые индикаторы достижения компетенции: ОПК-1.

*В заданиях 1-3 выбрать правильную комбинацию ответов и дать её буквенное обозначение.*

А – если верно 1,2,3;

Г – если верно 2,5;

Б – если верно 2,3;

Д – если верно 2.

В – если верно 2,4,3;

1. Ацидофобными являются:

1) пиридин;

3) фуран;

5) тиофен.

2) пиррол;

4) тиазол;

2. Дескрипторами элементного уровня являются:

1) индексы Плата F(G);

2) брутто-формула;

3) направление дипольного момента;

4) константы диссоциации кислот и оснований;

5) конформационное пространственное строение молекул.

3. Первичные радикалы, образующиеся в нашем организме- это:

1) радикал гидроксила;

4) пероксинитрит;

2) супероксид;

5) убихинол.

3) липидные радикалы;

*В заданиях 4-8 только один ответ является верным. Напишите букву, соответствующую правильному ответу.*



Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации

4. Выберите из следующих соединений С-Н-кислоту:

- а) муравьиная кислота; г) малоновый эфир;  
б) этанол; д) пиррол.  
в) мочевиная;

5. Выберите из следующих соединений функциональные производные карбоновых кислот:

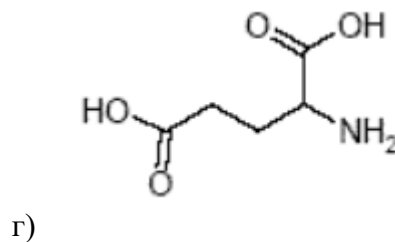
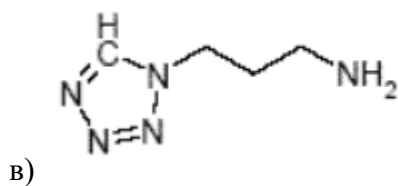
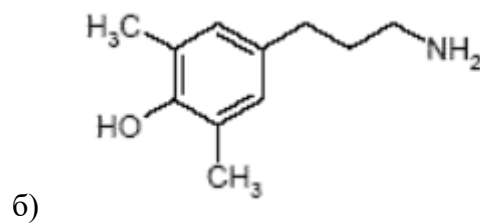
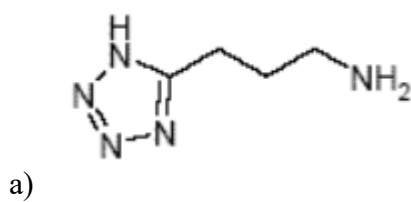
- а) уксусная кислота; б) ацетилхлорид; в) никотиновая кислота; г) бутин-2.

6. При проведении молекулярного докинга антихолинэстеразных средств в отношении ацетилхолинэстеразы были получены следующие данные. Определите какое из соединений обладает более выраженным сродством к мишени.

Препарат Энергия связывания ккал/моль

- а) Галантамин -56,3  
б) Ипидакрин -10,6  
в) Физостигмин -47,6  
г) Дистигмин -53,8  
д) Пиридостигмин -16,1.

7. Из приведенных структур выберите биоизостергамма-аминомасляной кислоты;



8. Выберите скаффолд сульфаниламидов:

- а) флавоон; б) стрептоцид; в) пенициллин; г) этанол.



Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации

В заданиях 9-10 закончить ответы.

9. Продукт этерификации этиловым спиртом пара аминокислоты называется ...

10. Набор пространственных и электронных признаков, необходимых для обеспечения оптимальных супрамолекулярных взаимодействий со специфической биологической мишенью, которые могут вызывать (или блокировать) её биологический ответ называется ...

Ответы: 1-б, 2-д, 3-г, 4-г, 5-б, 6-а, 7-а, 8-б, 9- анестезин, 10- фармакофор.

### Пример билета домашнего задания

1. Напишите структурные формулы следующих соединений, укажите какие из них могут быть получены по реакции С-, О-, N-ацилирования, приведите уравнения соответствующих реакций:

- а) стрептоцид; г) метилфенилбензол;  
б) фенацетин; д) этилацетат.

Укажите лекарственные препараты и их применение в медицине.

2. Напишите уравнения следующих реакций. Укажите, в каких из них формируется связь  $Csp^3-N$  и  $Csp^2-N$ :

- а) бутиламин и серная кислота;  
б) пропан и азотная кислота;  
в) пиридин и амид натрия;  
г) п-аминофенол и уксусный альдегид.

Какие из продуктов реакции используют в медицине?

3. Запишите уравнениями реакций следующие превращения, назовите все органические вещества:

### 7.2 Вопросы для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, необходимых для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в ходе промежуточной аттестации студентов.

#### Пример билета контрольной работы №1

1. Докажите основные свойства атомов азота в молекуле никотина. Укажите, к какому типу (пиррольному или пиридиновому) относится каждый атом азота в данном соединении?

- 1) пиррольного типа
- 2) пиридиновому типа



Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации

- 3) первичный
  - 4) вторичный.
2. Поясните термины гликозид, к какому типу гликозидов относится аденинмонофосфат. «О-ацилирование», «С-ацилирование», «N-ацилирование» на примере *n*-аминосалициловой кислоты приведите соответствующие реакции.
- 1) О-ацилирование
  - 2) С-ацилирование
  - 3) N-ацилирование
3. Нуклеофильные свойства диазола проявляют при взаимодействии с:
- 1) галогенами
  - 2) галогеналканами;
  - 3) галогеноводородами;
  - 4) галогенидами фосфора.
4. Продукт полного гидрирования пиррола называется: б) пирролидин; в) г) пиразолидин.
- экспертные системы
- 1) пирролин;
  - 2) пирролидин;
  - 3) пиразол;
  - 4) пиразолидин.
5. Нуклеофильные свойства тиазола проявляются при взаимодействии с:
- 1) бромэтаном;
  - 2) амидом натрия;
  - 3) соляной кислотой;
6. Пиримидин – это азотсодержащее гетероароматическое соединение, имеющее:
- 1) один гетероатом пиррольного типа;
  - 2) один гетероатом пиридинового типа;
  - 3) два гетероатома пиридинового типа в положениях 1 и 4.
  - 4) гетероатомы и пиррольного и пиридинового типов.
7. Ядро пиридина входит в состав следующих лекарственных средств:
- 1) никотинамид;
  - 2) кордиамин;
  - 3) фенобарбитал;
  - 4) барбитал;
  - 5) фтивазид.

**Пример билета контрольной работы №2**

1. Приведите и охарактеризуйте этапы поиска биологически активного вещества.





**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

2. Вычислите и охарактеризуйте параметры ADME изониазида, используя сервис SwissADME для Homo sapiens.
3. При проведении молекулярного докинга нейрорептиков в отношении дофаминовых D2-рецепторов были получены следующие данные. Определите, какое из соединений обладает более выраженным сродством к белковой мишени, укажите физико-химические основы этого взаимодействия.

Препарат	Энергия связывания ккал/моль
Аминазин	-52,7
Галоперидол	-49,4
Алимемазин	-74,9
Сертиндол	-10,8
Клозапин	-96,5

4. Что такое биоизостерная модификация структур БАВ. Приведите примеры таких структур. Приведите синтез барбитала из малоновой кислоты.
5. Проанализировав строение габапентина, предскажите его химические свойства. Ответ подтвердите уравнениями реакций (по три на каждую функциональную группу).

***Проверяемые индикаторы достижения компетенции: ИД ОПК-1.2.1, 1.3.1***

1. С целью импорта замещения разработан новый лабораторный регламент активной фармацевтической субстанции. Требуется осуществить анализ на присутствие родственных примесей, а также осуществить планирование фармакологического эксперимента связанного с их возможными негативными побочными свойствами. Какие программы следует использовать для этого, и какие скрининговые фармакологические тесты должны быть выполнены в первую очередь.
2. Эксперт по медицинской химии получил задание по сбору и систематизации информации подготовки обзора и мониторинга новейших химических и фармацевтических разработок по препаратам противовоспалительного действия. Посредством каких онлайн ресурсов и выбор какой биологической мишени следует использовать для реализации этого обзора.
3. С помощью логико-структурного подхода генерированы ряды виртуальных структур противовоспалительных БАС в соответствии с реализуемым проектом. На этом этапе поиска соединений-лидеров требуется убедиться о новизне этих структур и возможном вхождении субструктурного фрагмента в известные и описанные вещества, внесенные в банки данных хемоинформационных библиотек. Приведите компьютерные программы используемые для этого и укажите алгоритм анализа.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

4. Консультанту по медицинской химии осуществлен *insilico* эксперимент посредством компьютерных программ, основанных на представлениях молекул в 2D измерении. Проведите расчет дескрипторов лекарствоводия и фармакокинетики и с помощью сравнительный анализ этих дескрипторов, сделайте выводы и подготовьте рекомендации.
5. Сотруднику по медицинской химии дано задание с помощью ретроспективного анализа предложить ряд наиболее эффективных способов получения наиболее перспективных соединений производных хиназолин-4(3*H*)-она. Опишите ход синтетических исследований и обоснуйте, технических заданий для поставщиков химических реактивов, а также выберите наиболее экономически выгодный метод.

### **7.3 КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ**

***Проверяемые индикаторы достижения компетенции: ИД ОПК-1.1.1***

1. Приведите структурные формулы неклассических биоизостеров: а) гамма-аминомасляная кислота б) изогувацин
2. Перечислите принципы молекулярного конструирования противосудорожных средств.
3. Напишите формулу никотина – главного алкалоида табака. Приведите реакцию его взаимодействия с эквимолярным количеством хлороводородной кислоты при комнатной температуре. Объясните, какой из 2-х атомов азота в его молекуле и почему обладает большей активностью в данной реакции.
4. Известно, что аденозин обладает противоаритмическим действием, а также в организме играет важную роль в биохимических процессах, таких как передача энергии (АТФ и АДФ) и сигналов. Напишите уравнение реакции образования данного нуклеозида из соответствующей нуклеиновой кислоты и моносахарида.
5. Приведите схему получения ноотропного препарата фенотропила путем алкилирования 4-фенил-2-пирролидона этилмонохлорацетатом и последующим амминированием образующегося эфира газообразным аммиаком.
6. Приведите формулы прокаина и его изостерапрокаинамида, к каким классическим или неклассическим биоизостерам они относятся.
7. Приведите схему образования 5-фторуридина (N-гликозида рибозы и 5-фторурацила), а затем его 3-монофосфата. Укажите, какой продукт является нуклеотидом, а какой – нуклеозидом. Дайте определения этим понятиям.
8. Синтез антиаритмика этмозина можно провести путем последовательных реакций из м-нитроанилина, напишите схему его получения.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

9. Приведите формулы бензола, метилбензола, хлорбензола, тиофена, 2-метилтиофена и 2-хлортиофена. Какие из них являются биоизостерами?
10. Укажите преимущества и недостатки жидкофазного синтеза.
11. Цитарабин – пиримидиновый антиметаболит, аналог цитидина, оказывающий противоопухолевое и иммунодепрессивное действие. Напишите структурную формулу данного препарата и укажите реакционные центры.
12. Можно синтезировать препарат антиаритмического действия этацизина путем последовательных реакций из м-нитроанилина, напишите схему его получения.
13. Приведите структурную формулу гамма-аминомасляной кислоты и ее биоизостеров.
14. Укажите, какие функциональные группы и в какой области ИК-спектра можно обнаружить для аминазина.
15. Предложите метод синтеза барбитала из мочевины и диэтилмалоновой кислоты. Какие виды таутомерии и почему характерны для этого препарата? Какой из таутомеров и почему используется для получения лекарственного препарата, лучше растворимого в воде, чем сам барбитал?
16. Напишите формулы, пронумеруйте атомы и назовите гетероциклы, которые лежат в основе:  
а) тубазида;      б) фуразолидона;      в) фтивазида;      г) 5-НОК
17. Какие типы полимерных смол используются для комбинаторного синтеза?
18. Укажите, какой вид таутомерии характерен для ксантина. Объясните причину существования таутомерных форм. Какие из них и почему будут реагировать с: а) NaOH, б) HCl? Приведите уравнения реакций.
19. Синтез антимикробного препарата сульфадиазина осуществляют путем последовательных реакций из N-ацетиламинобензолсульфохлорида. Приведите схему его образования.
20. Напишите уравнения реакций сульфирования, нитрования, бромирования с биоизостерами – никотиномидом и тиазол-4-амидом.
21. Объясните, какая общая фармакопейная реакция используется для открытия алкалоидов группы пурина. Опишите ход выполнения этой реакции, укажите аналитический эффект. Как кофеин применяется в медицине?
22. Отнеся тиазол к  $\pi$ -избыточным,  $\pi$ -дефицитным или  $\pi$ -амфотерным системам (дайте



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

- определения этим понятиям), объясните, почему для него возможны реакции SN и подтвердите реакцией аминирования.
23. Приведите схему синтеза фуразолидона путем последовательных реакций из 2-гидразиноэтанола.
24. Приведите структурные формулы никотинамида и его биоизостера амидатиазол-5-карбоновой кислоты.
25. Объясните термин «сердечные гликозиды». Укажите, из каких структурных фрагментов они состоят и как это влияет на их свойства (физические и фармакологические). Приведите один пример, назовите вещество.
26. Промышленный способ синтеза антимикобактериального препарата пиразинамида, взаимодействием на первой стадии о фенилендиамида с глиоксалем. Приведите схему его получения.
27. Биоизостерным аналогом п-аминобензойной кислоты является белый стрептоцид. Приведите формулы этих соединений, назовите их по заместительной номенклатуре.
28. Поясните термин «комбинаторный синтез» и укажите, в каких направлениях используется.
29. Предложите схемы получения тубазида и фтивазида. Укажите значение данных препаратов в медицине.
30. Синтез антиаритмиканикаминамида можно осуществить путем последовательных реакций из п-нитробензоилхлорида. Приведите схему получения никитинамида.

**Примерные темы рефератов:**

1. Основы компьютерного молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов.
2. Современные представления о роли антиоксидантов.
3. Пространственное строение и биологическая активность.
4. Понятие о дескрипторах молекулярной структуры. Использование молекулярных дескрипторов в поиске биологически активных соединений.
5. Лекарственные препараты на основе алкалоидов, их создание и применение в медицине.
6. Представление об основных подходах к модификации соединения-лидера.
7. Оптимизация структур соединений-лидеров для улучшения их фармакокинетических и фармакодинамических характеристик



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

8. Количественные характеристики биологической активности. Введение в методологию QSAR.
9. Наноплатформы для адресной доставки лекарств.
10. Первичная модификация соединения-лидера. Биоизостерическая замена.
11. Первичная модификация соединения-лидера. Гомологизация. Конформационное ограничение.
12. Первичная модификация соединения-лидера. Винилологи, бензологи.
13. Аминокислоты, лекарственные препараты на основе пептидов. Пептидомиметики.
14. Общая характеристика витаминов. Лекарственные средства, содержащие фрагменты витаминов.
15. Системы передач рецепторного сигнала и вторичные посредники. Теоретические основы лиганд – рецепторных взаимодействий.
16. Ферменты (принципы действия и регуляция активности). Ингибиторы ферментов в современном арсенале лекарственных средств.
17. Нуклеиновые кислоты как мишени для биологически активных веществ.
18. Фармакокинетика (основные понятия и модели). Роль фармакокинетических исследований в создании новых лекарственных средств.
19. Выбор стратегии исследований при создании новых лекарственных средств и критерии оценки качества структуры-лидера.
20. Источники поиска новых лекарственных средств.
21. Современные методы усовершенствования структуры лидера. Конформационные ограничения.
22. Комбинаторный синтез и его роль в поиске структур-лидеров.
23. Количественные соотношения структура-активность. Краткий исторический обзор, основные методологические понятия.
24. «Двойные лекарства», пролекарства и биопредшественники.
25. Понятие о соединении-лидере и стратегиях его поиска.
26. Модификация структур соединений-лидеров для улучшения их фармакокинетических и фармакодинамических характеристик.
27. Мишени действия лекарственных веществ в организме. Взаимосвязь структуры лекарства и его биологической мишени.
28. Терпеноиды и стероиды. Лекарственные препараты на их основе.
29. Нуклеиновые кислоты. Лекарственные препараты на основе нуклеозидов и нуклеотидов.
30. Дескрипторы молекулярной структуры (молекулярный граф, топологические индексы, индексы, основанные на физико-химических и квантово-химических характеристиках).



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

**7.3. Критерии оценки при текущем и промежуточном контроле  
КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ ОТВЕТА СТУДЕНТА ПРИ 100-БАЛЛЬНОЙ СИСТЕМЕ**

Характеристика ответа	Оценка ECTS	Баллы в БРС	Уровень сформированности компетентности по дисциплине	Оценка
<p>Дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, показана совокупность осознанных знаний об объекте, проявляющаяся в свободном оперировании понятиями, умении выделить существенные и несущественные его признаки, причинно-следственные связи. Знание об объекте демонстрируется на фоне понимания его в системе данной науки и междисциплинарных связей. Ответ формулируется в терминах науки, изложен литературным языком, логичен, доказателен, демонстрирует авторскую позицию студента. В полной мере овладел компетенциями.</p>	А	100-96	<b>ВЫСОКИЙ</b>	5
<p>Дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, показана совокупность осознанных знаний об объекте, проявляющаяся в свободном оперировании понятиями, умении выделить существенные и несущественные его признаки, причинно-следственные связи. Знание об объекте демонстрируется на фоне понимания его в системе данной науки и междисциплинарных связей. Ответ формулируется в терминах науки, изложен литературным языком, логичен, доказателен, демонстрирует авторскую позицию студента. В полной мере овладел компетенциями.</p>	В	95-91	<b>ВЫСОКИЙ</b>	5



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

<p>Дан полный, развернутый ответ на поставленный вопрос, доказательно раскрыты основные положения темы; в ответе прослеживается четкая структура, логическая последовательность, отражающая сущность раскрываемых понятий, теорий, явлений. Ответ изложен литературным языком в терминах науки. В ответе допущены недочеты, исправленные студентом с помощью преподавателя. В полной мере овладел компетенциями.</p>	С	90-76	<b>СРЕДНИЙ</b>	4
<p>Дан недостаточно полный и последовательный ответ на поставленный вопрос, но при этом показано умение выделить существенные и несущественные признаки и причинно-следственные связи. Ответ логичен и изложен в терминах науки. Могут быть допущены 1-2 ошибки в определении основных понятий, которые студент затрудняется исправить самостоятельно. Слабо овладел компетенциями.</p>	D	75-66	<b>НИЗКИЙ</b>	3
<p>Дан неполный ответ, логика и последовательность изложения имеют существенные нарушения. Допущены грубые ошибки при определении сущности раскрываемых понятий, теорий, явлений, вследствие непонимания студентом их существенных и несущественных признаков и связей. В ответе отсутствуют выводы. Слабо овладел компетенциями.</p>	E	65-61	<b>КРАЙНЕ НИЗКИЙ</b>	3
<p>Дан неполный ответ, представляющий собой разрозненные знания по теме вопроса с существенными ошибками в определениях. Присутствуют фрагментарность, нелогичность изложения. Студент не осознает связь данного понятия, теории, явления с другими объектами дисциплины. Отсутствуют выводы, конкретизация и доказательность изложения. Речь неграмотная. Дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя не приводят к коррекции ответа студента не только на поставленный вопрос, но и на другие вопросы дисциплины. Компетенции не сформированы.</p>	F	60-0	<b>НЕ СФОРМИРОВАНА</b>	2



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

### 8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

№ п/п	Наименование дисциплины (модуля), практик в соответствии с учебным планом	Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	<b>Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ</b>	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: Правый лекционный зал (295) 357532, Ставропольский край, город Пятигорск, проспект Калинина, дом 11; Уч.корп.№1	Проектор Ноутбук Доска ученическая Столы ученические Стулья ученические Стол для преподавателя Стул преподавателя Набор демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующий программе дисциплины, рабочим учебным программам дисциплин	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. MicrosoftOffice 365. Договор с ООО СТК «ВЕРШИНА» №27122016-1 от 27 декабря 2016 г.</li> <li>2. Kaspersky Endpoint Security Russian Edition. 100149 Educational Renewal License 1FB6161121102233870682. 100 лицензий.</li> <li>3. Office Standard 2016. 200 лицензий OPEN 96197565ZZE1712.</li> <li>4. Microsoft Open License :66237142 OPEN 96197565ZZE1712. 2017</li> <li>5. Microsoft Open License : 66432164 OPEN 96439360ZZE1802. 2018.</li> <li>6. Microsoft Open License : 68169617 OPEN 98108543ZZE1903. 2019.</li> <li>7. Операционные системы OEM, OS Windows XP; OS Windows 7; OS Windows 8; OS Windows 10. На каждом системном блоке и/или моноблоке и/или ноутбуке. Номер лицензии скопирован в ПЗУ аппаратного средства и/или содержится внаклеенном на устройство</li> </ol>





**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

				<p>стикере с голографической защитой.</p> <p>8. Система автоматизации управления учебным процессом ООО «Лаборатория ММИС»</p> <p>9. Доступ к личному кабинету в системе «4Portfolio». Договор № В-21.03/2017 203 от 29 марта 2017</p> <p>10. Доступ к личному кабинету в системе «ЭИОС»</p> <p>11. Система электронного тестирования VeralTestProfessional 2.7. Акт предоставления прав № ИТ178496 от 14.10.2015 (бессрочно)</p>
--	--	--	--	--

## **9. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ**

Обучение обучающихся с ограниченными возможностями здоровья при необходимости осуществляется с использованием специальных методов обучения и дидактических материалов, составленных с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья таких обучающихся (обучающегося).

**В целях освоения рабочей программы дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья кафедра обеспечивает:**

- 1) для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по зрению:
  - размещение в доступных для обучающихся, являющихся слепыми или слабовидящими, местах и в адаптированной форме справочной информации о расписании учебных занятий;
  - присутствие ассистента, оказывающего обучающемуся необходимую помощь;
  - выпуск альтернативных форматов методических материалов (крупный шрифт или аудиофайлы);
- 2) для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху:
  - надлежащими звуковыми средствами воспроизведение информации;
- 3) для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата:



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

- возможность беспрепятственного доступа обучающихся в учебные помещения, туалетные комнаты и другие помещения кафедры, а также пребывание в указанных помещениях.

**Образование обучающихся с инвалидностью и ограниченными возможностями здоровья** может быть организовано как совместно с другими обучающимися, так и в отдельных группах.

**Перечень учебно-методического обеспечения самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (при наличии)**

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Категории студентов	Формы
С нарушением слуха	- в печатной форме; - в форме электронного документа;
С нарушением зрения	- в печатной форме увеличенным шрифтом; - в форме электронного документа; - в форме аудиофайла;
С нарушением опорно-двигательного аппарата	- в печатной форме; - в форме электронного документа; - в форме аудиофайла;

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине.

Перечень фондов оценочных средств, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы для студентов с инвалидностью и с ограниченными возможностями здоровья включает следующие оценочные средства:

Категории студентов	Виды оценочных средств	Формы контроля и оценки результатов
С нарушением слуха	тест	преимущественно письменная проверка
С нарушением зрения	собеседование	преимущественно устная проверка (индивидуально)
С нарушением опорно-двигательного аппарата	решение дистанционных тестов, контрольные вопросы	организация контроля с помощью электронной оболочки MOODLE, письменная проверка

Студентам с инвалидностью и с ограниченными возможностями здоровья увеличивается время на подготовку ответов к зачёту.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями. Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом;
- в форме электронного документа;
- в форме аудиофайла.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме;
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме;
- в форме электронного документа;
- в форме аудиофайла.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся. При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) обеспечивается выполнение следующих дополнительных требований в зависимости от индивидуальных особенностей обучающихся:

1. инструкция по порядку проведения процедуры оценивания предоставляется в доступной форме (устно, в письменной форме);
2. доступная форма предоставления заданий оценочных средств (в печатной форме, в печатной форме увеличенным шрифтом, в форме электронного документа, задания зачитываются ассистентом);
3. доступная форма предоставления ответов на задания (письменно на бумаге, набор ответов на компьютере, с использованием услуг ассистента, устно).

При необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю) может проводиться в несколько этапов.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья предоставляются основная и дополнительная учебная литература в виде электронного документа в фонде библиотеки и/или в электронно-библиотечных системах. А также предоставляются бесплатно специальные учебники и учебные пособия, иная учебная литература и специальные технические средства обучения коллективного и индивидуального пользования

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная работа. Под индивидуальной работой подразумевается две формы взаимодействия с преподавателем: индивидуальная учебная работа (консультации), т.е. дополнительное разъяснение учебного материала и углубленное изучение материала с теми обучающимися, которые в этом заинтересованы, и индивидуальная воспитательная работа. Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или обучающимся с ограниченными возможностями здоровья.

Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Освоение дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с использованием средств обучения общего и специального назначения:

– лекционная аудитория – мультимедийное оборудование, мобильный радиокласс (для студентов с нарушениями слуха); источники питания для индивидуальных технических средств;

- учебная аудитория для практических занятий (семинаров) мультимедийное оборудование, мобильный радиокласс (для студентов с нарушениями слуха);

- учебная аудитория для самостоятельной работы – стандартные рабочие места с персональными компьютерами; рабочее место с персональным компьютером, с программой экранного доступа, программой экранного увеличения и брайлевским дисплеем для студентов с нарушением зрения.

В каждой аудитории, где обучаются инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, должно быть предусмотрено соответствующее количество мест для обучающихся с учётом ограничений их здоровья.

В учебные аудитории должен быть беспрепятственный доступ для обучающихся инвалидов и обучающихся с ограниченными возможностями здоровья.

## **10. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭЛЕКТРОННОГО ОБУЧЕНИЯ И ДИСТАНЦИОННЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

В соответствии с Положением о порядке применения электронного обучения и дистанционных образовательных технологий в Пятигорском медико-фармацевтическом институте – филиале федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации, утвержденным Ученым советом 30.08.2019, учебный процесс по настоящей программе может осуществляться с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ) и/или электронного обучения в порядке, установленном федеральными органами исполнительной власти, распорядительными актами ФГБОУ ВолгГМУ Минздрава России, ПМФИ – филиала ФГБОУ ВО ВолгГМУ Минздрава России.

### **10.1. Реализация основных видов учебной деятельности с применением электронного обучения, ДОТ.**

С применением электронного обучения или ДОТ могут проводиться следующие виды занятий:



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

Лекция может быть представлена в виде текстового документа, презентации, видео-лекции в асинхронном режиме или посредством технологии вебинара – в синхронном режиме. Преподаватель может использовать технологию web-конференции, вебинара в случае наличия технической возможности, согласно утвержденного тематического плана занятий лекционного типа.

Семинарские занятия могут реализовываться в форме дистанционного выполнения заданий преподавателя, самостоятельной работы. Задания на самостоятельную работу должны ориентировать обучающегося преимущественно на работу с электронными ресурсами. Для коммуникации во время семинарских занятий могут быть использованы любые доступные технологии в синхронном и асинхронном режиме, удобные преподавателю и обучающемуся, в том числе чаты в мессенджерах.

Самостоятельная работа с использованием дистанционных образовательных технологий предусматривает: чтение электронного текста (учебника, учебного пособия, лекции, презентации и т.д.), конспектирование текста; ознакомление с нормативными документами.

Все виды занятий реализуются согласно утвержденному тематическому плану. Материалы размещаются в ЭИОС института.

Учебный контент, размещаемый в ЭИОС, снабжен комплексом пошаговых инструкций, позволяющих обучающемуся правильно выполнить методические требования.

Методические материалы адаптированы к осуществлению образовательного процесса с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

### **10.2. Контроль и порядок выполнения внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся**

Контрольные мероприятия предусматривают текущий контроль по каждому занятию, промежуточную аттестацию в соответствии с рабочей программой дисциплины.

Обучающийся обязан выслать выполненное задание преподавателю, начиная с дня проведения занятия и заканчивая окончанием следующего рабочего дня.

Преподаватель обязан довести оценку по выполненному занятию не позднее следующего рабочего дня после получения работы обучающегося.

Контроль выполнения внеаудиторной самостоятельной работы осуществляется путем проверки реализуемых компетенций согласно настоящей программы и с учетом фондов оценочных средств для текущей аттестации при изучении данной дисциплины. Отображение хода образовательного процесса осуществляется путем отражения учебной активности обучающихся в кафедральном журнале (на бумажном носителе).

### **10.3. Регламент организации и проведения промежуточной аттестации с применением ЭО и ДОТ**

При организации и проведении промежуточной аттестации с применением электронного обучения, дистанционных образовательных технологий кафедра:

- совместно с отделом информационных технологий создает условия для функционирования ЭИОС, обеспечивающей полноценное проведение промежуточной аттестации в полном объеме независимо от места нахождения обучающихся;



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

- обеспечивает идентификацию личности обучающегося и контроль соблюдения условий проведения зачетных процедур, в рамках которых осуществляется оценка результатов обучения.

Зачетные процедуры проводятся в асинхронном режиме с учетом аутентификации обучающегося через систему управления обучением (LMS).

Проведение промежуточной аттестации по дисциплине регламентируется п. 7 рабочей программы дисциплины, включая формируемый фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации. Порядок проведения промежуточной аттестации осуществляется в форме:

- Устного собеседования («опрос без подготовки»)

## **11. ВОСПИТАТЕЛЬНЫЙ КОМПОНЕНТ ДИСЦИПЛИНЫ**

11.1. Воспитание в ПМФИ – филиале ФГБОУ ВО ВолгГМУ Минздрава России является неотъемлемой частью образования, обеспечивающей систематическое и целенаправленное воздействие на студентов для формирования профессионала в области медицины и фармации как высокообразованной личности, обладающей достаточной профессиональной компетентностью, физическим здоровьем, высокой культурой, способной творчески осуществлять своё социальное и человеческое предназначение.

11.2. **Целью** воспитательной работы в институте является полноценное развитие личности будущего специалиста в области медицины и фармации при активном участии самих обучающихся, создание благоприятных условий для самоопределения и социализации обучающихся на основе социокультурных и духовно-нравственных ценностей народов России, формирование у студентов социально-личностных качеств: гражданственности, целеустремленности, организованности, трудолюбия, коммуникабельности.

11.3. Для достижения поставленной цели при организации воспитательной работы в институте определяются **следующие задачи**:

- развитие мировоззрения и актуализация системы базовых ценностей личности;
- приобщение студенчества к общечеловеческим нормам морали, национальным устоям и академическим традициям;
- воспитание уважения к закону, нормам коллективной жизни, развитие гражданской и социальной ответственности;
- воспитание положительного отношения к труду, воспитание социально значимой целеустремленности и ответственности в деловых отношениях;
- обеспечение развития личности и ее социально-психологической поддержки, формирование личностных качеств, необходимых для эффективной профессиональной деятельности;
- выявление и поддержка талантливой молодежи, формирование организаторских навыков, творческого потенциала, вовлечение обучающихся в процессы саморазвития и самореализации;
- формирование культуры и этики профессионального общения;



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

- воспитание внутренней потребности личности в здоровом образе жизни, ответственного отношения к природной и социокультурной среде;
- повышение уровня культуры безопасного поведения;
- развитие личностных качеств и установок, социальных навыков и управленческих способностей.

***Направления воспитательной работы:***

- Гражданское,
- Патриотическое,
- Духовно-нравственное;
- Студенческое самоуправление;
- Научно-образовательное,
- Физическая культура, спортивно-оздоровительное и спортивно-массовое;
- Профессионально-трудовое,
- Культурно-творческое и культурно-просветительское,
- Экологическое.

***Структура организации воспитательной работы:***

Основные направления воспитательной работы в ПМФИ – филиале ФГБОУ ВО ВолгГМУ Минздрава России определяются во взаимодействии заместителя директора по учебной и воспитательной работе, отдела по воспитательной и профилактической работе, студенческого совета и профкома первичной профсоюзной организации студентов. Организация воспитательной работы осуществляется на уровнях института, факультетов, кафедр.

***Организация воспитательной работы на уровне кафедры***

На уровне кафедры воспитательная работа осуществляется на основании рабочей программы воспитания и календарного плана воспитательной работы, являющихся частью образовательной программы.

Воспитание, осуществляемое во время аудиторных занятий и самостоятельной работы обучающихся должно составлять 75% от всей воспитательной работы с обучающимися в ПМФИ – филиале ВолгГМУ (относительно 25%, приходящихся на внеаудиторную работу).

На уровне кафедры организацией воспитательной работой со студентами руководит заведующий кафедрой.

*Основные функции преподавателей при организации воспитательной работы с обучающимися:*

- формирование у студентов гражданской позиции, сохранение и приумножение нравственных и культурных ценностей в условиях современной жизни, сохранение и возрождение традиций института, кафедры;
- информирование студентов о воспитательной работе кафедры,
- содействие студентам-тьюторам в их работе со студенческими группами;
- содействие органам студенческого самоуправления, иным объединениям студентов, осуществляющим деятельность в институте,
- организация и проведение воспитательных мероприятий по плану кафедры, а также участие в воспитательных мероприятиях общевузовского уровня.



**Пятигорский медико-фармацевтический институт –  
филиал федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Волгоградский государственный медицинский университет»  
Министерства здравоохранения  
Российской Федерации**

*Универсальные компетенции, формируемые у обучающихся в процессе реализации воспитательного компонента дисциплины:*

- Способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий;
- Способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла;
- Способность организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели;
- Способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном языке, для достижения академического и профессионального взаимодействия;
- Способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия;
- Способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки и образования в течение всей жизни;
- Способность поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности;
- Способность создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций.