

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.ф.н. И.П. Кодониди

« 31 » августа 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ

По специальности: *33.05.01 Фармация (уровень специалитета)*

Квалификация выпускника: *провизор*

Кафедра: *органической химии*

Курс –**4**

Семестр –**VII**

Форма обучения – **очная**

Лекции – **18 часа**

Практические занятия – **48 часа**

Самостоятельная работа – **37,8 часов**

Промежуточная аттестация: *зачет*–**VII
семестр**

Трудоемкость дисциплины: **3 ЗЕ (108 часов)**

Пятигорск, 2024

Рабочая программа дисциплины «Медицинская химия» составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по специальности Стоматология (уровень специалитета) (утвер. Приказом Министерства образования и науки РФ от 12 августа 2020 г. № 984)

Разработчики программы:

д.ф.н., зав. каф., профессор Оганесян Эдуард Тоникович,

к.х.н., доцент каф. органической химии Л.И. Бутенко.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры органической химии
Протокол № 1 от «___» августа 2024 г.

Рабочая программа согласована с учебно-методической комиссией
по циклу естественно-научных дисциплин

Рабочая программа согласована с библиотекой
Заведующая библиотекой И.В. Свешникова

И.о. декана факультета Т.В. Симонян

Рабочая программа утверждена на заседании Центральной методической комиссии
Протокол № 1 от «31» августа 2024 года

Рабочая программа утверждена на заседании Ученого совета ПМФИ
Протокол №1 от «31» августа 2024 года

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель дисциплины: 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».

Задачи дисциплины:

- 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 В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина «Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» основной профессиональной образовательной программы. Дисциплина «Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ» изучается в VII семестре очной формы обучения. (Б1.Б13 базовая часть).

2. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Код и наименование компетенции	Наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
УК-1. Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	ИДУК-1.-Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними ИДУК-1.-2 Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению ИДУК-1.-3 Критически оценивает надежность источников информации,	Знать: 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

	<p>работает с противоречивой информацией из разных источников</p> <p>ИДУК-1.-4 Разрабатывает и содержательно аргументирует стратегию</p> <p>решения проблемной ситуации на основе системного и междисциплинарного подходов</p>	<p>медицинской продукции, основы управления проектом (3.1.5)</p> <p>Уметь: - 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)</p> <p>оценивать и осуществлять анализ научных данных для целей химического и фармакологического скрининга (3.2.2)</p> <p>- осуществлять необходимые расчеты, вычисления и построение моделей с использованием специализированных аналитических инструментов и методов 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 реализации проекта по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу (3.2.5)</p> <p>Владеть: отбором и систематизацией 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)</p> <p>- молекулярного моделирования структур биологически активных соединений 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>
<p>ОПК-1. Способен использовать основные биологические, физико-химические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов</p>	<p>ИДОПК-1.-1 Применяет основные биологические методы анализа для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств и лекарственного растительного сырья</p>	
	<p>ИДОПК-1.-2 Применяет основные физико-химические и химические методы анализа для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, лекарственного растительного сырья и биологических объектов</p>	
	<p>ИДОПК-1.-3 Применяет основные методы физико-химического анализа в изготовлении лекарственных препаратов</p>	
	<p>ИДОПК-1.-4 Применяет математические методы и осуществляет математическую обработку данных, полученных в ходе разработки лекарственных средств, а также исследований и экспертизы лекарственных средств, лекарственного растительного сырья и биологических объектов</p>	
<p>ПК-1. Способен изготавливать лекарственные препараты и принимать участие в технологии производства готовых лекарственных средств, биологических и ветеринарных лекарственных средств</p>	<p>1.1 Способен подготовить рабочее место, технологическое оборудование, лекарственные и вспомогательные вещества к работе, провести выбор оптимальной лекарственной формы, выбирать оптимальную технологию и составляет макет лабораторного регламента, а также подобрать и рассчитать количества лекарственных и вспомогательных веществ с учетом влияния биофармацевтических факторов и совместимости</p>	

<p>ПК-5. Способен принимать участие в проведении исследований в области разработки методик для целей химико-токсикологического анализа и выполнять клинические лабораторные исследования третьей категории сложности, в том числе на основе внедрения новых методов и методик исследования</p>	<p>5.1. Способен проводить забор и подготовку проб биообъектов для химико-токсикологического анализа, проводить анализ токсических веществ, используя комплекс современных высокотехнологичных физико-химических, биологических и химических методов анализа, скрининговые методы современных токсикологически значимых соединений</p>	
<p>ПК 6. Способен принимать участие в проведении исследований в области оценки эффективности и безопасности лекарственных средств</p>	<p>6.1 Способен проводить изучение фармакологической активности и других видов активности различных соединений на лабораторных животных</p>	
<p>ПК 7. Способен участвовать в проведении научных исследований. Способен к анализу и публичному представлению научных данных</p>	<p>7.1 Способен проводить сбор и изучение современной научной литературы 7.2 Способен формулировать цели и задачи исследования, планировать эксперимент, проводить исследование, статистическую обработку экспериментальных и аналитических данных 7.3 Формулирует выводы и делает обоснованное заключение по результатам исследования</p>	

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ В ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦАХ С УКАЗАНИЕМ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ЧАСОВ, ВЫДЕЛЕННЫХ НА КОНТАКТНУЮ РАБОТУ ОБУЧАЮЩИХСЯ С ПРЕПОДАВАТЕЛЕМ (ПО ВИДАМ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ) И НА САМОСТОЯТЕЛЬНУЮ РАБОТУ ОБУЧАЮЩИХСЯ

4.1. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего часов	7 семестр
1. Контактная работа обучающихся с преподавателем:	108	108
Аудиторные занятия всего, в том числе:	70,2	70,2
Лекции	18	18
Лабораторные		
Практические занятия	48	48
Контактные часы на аттестацию (экзамен)		
Консультация	2	2
Контроль самостоятельной работы	2	2
2. Самостоятельная работа	37,8	37,8
Контроль	0,2	0,2
ИТОГО:	108	108

4.2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

(КАЛЕНДАРНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ЛЕКЦИЙ И ЗАНЯТИЙ)

Код занятия	Наименование разделов и тем/вид занятия/	Часов	Компетенции	Литература
ЛЕКЦИИ				
Раздел 1. Введение в медицинскую химию. Цели и задачи науки её связь с химическими и медико-				
Л.1.1.	Введение в основы дизайна лекарств. Цели и задачи науки её связь с химическими и медико-биологическими дисциплинами. Этапы создания первичного арсенала лекарственных средств. Качественная зависимость строение – биоактивность.	2	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
Л.1.2.	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	2	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
Л.1.3.	Комбинаторный синтез и его роль в поиске соединений-лидеров. Параллельный синтез индивидуальных соединений. Классические жидкофазные реакции, комбинаторный синтез на твердом носителе. 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	2	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.

Л.1.4.	Пролекарства. Принцип антиметаболитов в умозрительном дизайне ЛП. Эмпирические основы их дизайна. Пролекарства - это фармакологически неактивные соединения, которые превращаются в свои активные формы в результате метаболизма. Индукция метаболизма – ускорение метаболизма под действием химических веществ, в том числе и лекарственных. Ингибирование метаболизма – замедление метаболизма под действием химических веществ, в том числе и лекарственных	2	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
Л.1.5.	Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная зависимость строение – биоактивность. Принцип АРМЭТ и правила Липинского. Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи. Возможности применения данного метода компьютерного моделирования для прогнозирования биологической активности виртуальных соединений. Программное сопровождение.	2	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
Л.1.6.	Классификация свободных радикалов. Характеристика первичных, вторичных и третичных свободных радикалов. АФК, «активные формы кислорода», Свободнорадикальное (перекисное) окисление липидов (ПОЛ). Понятие о чужеродных радикалах. Пути формирования свободных радикалов. Роль свободных радикалов в процессах жизнеобеспечения клеток в различных биологических системах. Процессы образования свободных радикалов: гидропероксид, гидропероксид липидный гидропероксид, супероксид ($\bullet\text{OO}\cdot$), нитроксид ($\bullet\text{NO}$), убихинон ($\bullet\text{Q}$)	2	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.

Л.1.7.	<p>Ферменты, нормализующие окислительно-восстановительные процессы в организме. Сходство ферментов с минеральными катализаторами. Отличия ферментов от химических катализаторов. Роль ферментов в жизнедеятельности организма. Классификация ферментов. Механизм ферментативных реакций: «ключ – замок», «рука – перчатка». Органические вещества, способные формировать в организме токсические соединения (ксенобиотики). Метаболизм (биотрансформация) – изменение структуры и свойств лекарственных веществ под действием ферментов организма. Основным орган метаболизма – печень, но метаболические процессы могут протекать в почках, легких, коже, скелетных мышцах, кишечнике. Биотрансформация состоит из двух последовательных стадий: реакции I фазы (метаболическая трансформация) и реакции II фазы (конъюгация).</p>	2	ОПК -1	<p>7.2.4. 7.1.5. 7.3.</p>
Л.1.8.	<p>Антиоксиданты позволяют снизить степень окислительных повреждений. В функциональном смысле антиоксидант – это любое вещество, которое в более низкой концентрации, чем концентрация окисляемого вещества, существенно замедляет или предотвращает окисление этого вещества. Классификация антиоксидантов. Препараты, применяемые в качестве антиоксидантов: аскорбиновая кислота, или витамин С, терпеноидные хиноны и токохроманолы, витамин К1–филлохинон, токохроманолы, каротиноиды. Антиоксиданты пептидной и белковой природы. Окислительно-восстановительные превращения фенольных соединений.</p>	2	ОПК -1	<p>7.2.4. 7.1.5. 7.3.</p>
Л.1.9.	<p>Использование квантово-химических параметров для прогнозирования антирадикальной (НО) активности родственных структур, содержащих циннамоильный фрагмент.</p>	2	ОПК -1	<p>7.2.4. 7.1.5. 7.3.</p>
Всего:		18		

ЛАБОРАТОРНЫЕ/ ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

**Модуль 1. Введение в основы дизайна лекарств. Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ.
Качественная зависимость строение – биоактивность. Основные компьютерные методы,
используемые в драг-дизайне**

ЛЗ.1.1.	Введение в основы дизайна лекарств. Этапы создания первичного арсенала лекарственных средств.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.1.2.	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	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.1.3.	Понятие о биоизостеризме в поиске и усовершенствовании структур - лидеров и активных фармацевтических субстанций. Понятие о молекулярных дескрипторах, описывающих строение БАС. Современные методы количественной оценки структура-	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.1.4.	Комбинаторный синтез и его роль в поиске соединений-лидеров. Параллельный синтез индивидуальных соединений. Классические жидкофазные реакции, комбинаторный синтез на твердом носителе.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.1.5.	Пролекарства. Принцип антиметаболитов в умозрительном дизайне ЛП. Эмпирические основы их дизайна. Пролекарства - это фармакологически неактивные соединения, которые превращаются в свои активные формы в результате метаболизма. Индукция метаболизма – ускорение метаболизма под действием химических веществ, в том числе и лекарственных. Ингибирование метаболизма – замедление метаболизма под действием химических веществ, в том числе и лекарственных.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.1.6.	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	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.1.7.	Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная зависимость строение – биоактивность. Принцип АРМЭТ и правила Липинского.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.

ЛЗ.1.8.	Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи. Возможности применения данного метода компьютерного моделирования для прогнозирования биологической активности виртуальных соединений. Программное сопровождение.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.1.9.	Контрольная работа.	2		
Модуль 2. Флавоноиды, как антиоксиданты и источники новых биологически активных соединений.				
ЛЗ.2.1.	Пути формирования свободных радикалов. Роль свободных радикалов в процессах жизнеобеспечения клеток в различных биологических системах. Процессы образования свободных радикалов: липидный гидропероксид, супероксид ($\bullet\text{OO}^-$), нитроксид ($\bullet\text{NO}$), убихинон ($\bullet\text{Q}$).	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.2.2.	Классификация свободных радикалов. Характеристика первичных, вторичных и третичных свободных радикалов. АФК, «активные формы кислорода», Свободнорадикальное (перекисное) окисление липидов (ПОЛ). Понятие о чужеродных радикалах.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.2.3.	Ферменты, нормализующие окислительно-восстановительные процессы в организме. Сходство ферментов с минеральными катализаторами. Отличия ферментов от химических катализаторов. Роль ферментов в жизнедеятельности организма. Классификация	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
ЛЗ.2.4.	Органические вещества, способные формировать в организме токсические соединения (ксенобиотики). Метаболизм (биотрансформация) – изменение структуры и свойств лекарственных веществ под действием ферментов организма. Основной орган метаболизма – печень, но метаболические процессы могут протекать в почках, легких, коже, скелетных мышцах, кишечнике. Биотрансформация состоит из двух последовательных стадий: реакции I фазы (метаболическая трансформация) и реакции II фазы (конъюгация).	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.

ЛЗ.2.5.	<p>Антиоксиданты позволяют снизить степень окислительных повреждений. В функциональном смысле антиоксидант – это любое вещество, которое в более низкой концентрации, чем концентрация окисляемого вещества, существенно замедляет или предотвращает окисление этого вещества. Классификация антиоксидантов. Препараты, применяемые в качестве антиоксидантов: аскорбиновая кислота, или витамин С, терпеноидные хиноны и токохроманолы, витамин К1–филлохинон, токохроманолы, каротиноиды. Антиоксиданты пептидной и белковой природы. Окислительно-восстановительные превращения фенольных соединений.</p>	3	ОПК -1	<p>7.2.4. 7.1.5. 7.3.</p>
ЛЗ.2.6.	<p>Синтезы физиологически активных веществ на основе флавоноидов. Комплексообразующие свойства флавоноидов. Получение водорастворимого дигидрокверцетина. Классические реакции модификации дигидрокверцетина: реакции нуклеофильного замещения по гидроксильным группам, реакции с участием карбонильной группы, реакции электрофильного замещения в ароматическое кольцо.</p>	3	ОПК -1	<p>7.2.4. 7.1.5. 7.3.</p>
ЛЗ.2.7.	<p>Контрольная работа: Флавоноиды, как антиоксиданты и источники новых биологически активных соединений</p>	2		
ЛЗ.2.8.	<p>Зачётное занятие:</p>	2		
Всего:		48		

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование раздела дисциплины базовой части ФГОС	Содержание раздела
<p>Введение в основы дизайна лекарств. Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная зависимость строение – биоактивность. Основные компьютерные методы, используемые в драг-дизайне</p>	<p>Цели и задачи науки её связь с химическими и медико-биологическими дисциплинами. Этапы создания первичного арсенала лекарственных средств.</p> <p>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.</p> <p>Моделирование на основе структуры лиганда и белка. Понятие о биоизостеризме в поиске и усовершенствовании структур - лидеров и активных фармацевтических субстанций. Понятие о молекулярных дескрипторах, описывающих строение БАС. Современные методы количественной оценки структура-активность</p> <p>Комбинаторный синтез и его роль в поиске соединений-лидеров. Параллельный синтез индивидуальных соединений. Классические жидкофазные реакции, комбинаторный синтез на твердом носителе.</p> <p>Пролекарства. Принцип антиметаболитов в умозрительном дизайне ЛП. Эмпирические основы их дизайна. Пролекарства - это фармакологически неактивные соединения, которые превращаются в свои активные формы в результате метаболизма. Индукция метаболизма – ускорение метаболизма под действием химических веществ, в том числе и лекарственных. Ингибирование метаболизма – замедление метаболизма под действием химических веществ, в том числе и лекарственных.</p> <p>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.</p> <p>Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная зависимость строение – биоактивность. Принцип АРМЭТ и правила Липинского.</p> <p>Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи.</p> <p>Возможности применения данного метода компьютерного моделирования для прогнозирования биологической активности виртуальных соединений. Программное сопровождение.</p>
<p>Флавоноиды, как антиоксиданты и</p>	<p>Пути формирования свободных радикалов. Роль свободных радикалов в процессах жизнеобеспечения клеток в различных биологических системах. Процессы образования</p>

источники новых биологически активных соединений.

свободных радикалов: липидный гидропероксид, супероксид ($\bullet\text{OO}\cdot$), нитроксид ($\bullet\text{NO}$), убихинон ($\bullet\text{Q}$)

Классификация свободных радикалов. Характеристика первичных, вторичных и третичных свободных радикалов. АФК, «активные формы кислорода», Свободнорадикальное (перекисное) окисление липидов (ПОЛ). Понятие о чужеродных радикалах.

Ферменты, нормализующие окислительно-восстановительные процессы в организме. Сходство ферментов с минеральными катализаторами. Отличия ферментов от химических катализаторов. Роль ферментов в жизнедеятельности организма. Классификация ферментов. Механизм ферментативных реакций: «ключ – замок», «рука – перчатка».

Органические вещества, способные формировать в организме токсические соединения (ксенобиотики). Метаболизм (биотрансформация) – изменение структуры и свойств лекарственных веществ под действием ферментов организма. Основной орган метаболизма – печень но метаболические процессы могут протекать в почках, легких, коже, скелетных мышцах, кишечнике. Биотрансформация состоит из двух последовательных стадий: реакции I фазы (метаболическая трансформация) и реакции II фазы (конъюгация).

Пролекарства - это фармакологически неактивные соединения, которые превращаются в свои активные формы в результате метаболизма. Индукция метаболизма – ускорение метаболизма под действием химических веществ, в том числе и лекарственных. Ингибирование метаболизма – замедление метаболизма под действием химических веществ, в том числе и лекарственных.

Антиоксиданты позволяют снизить степень окислительных повреждений. В функциональном смысле антиоксидант – это любое вещество, которое в более низкой концентрации, чем концентрация окисляемого вещества, существенно замедляет или предотвращает окисление этого вещества. Классификация антиоксидантов. Препараты, применяемые в качестве антиоксидантов: аскорбиновая кислота, или витамин С, терпеноидные хиноны и токохроманолы, витамин К1– филлохинон, токохроманолы, каротиноиды. Антиоксиданты пептидной и белковой природы. Окислительно-восстановительные превращения фенольных соединений.

Флавоноиды, как антиоксиданты. Классификация флавоноидов: халкон, флаванон, флаванол, флавонол, флавонол. Применение в медицине сырья и препаратов, содержащих флавоноиды. Флавоноиды как антиоксиданты.

Синтезы физиологически активных веществ на основе флавоноидов. Комплексообразующие свойства флавоноидов. Получение водорастворимого дигидрокверцетина. Классические реакции модификации дигидрокверцетина:

	реакции нуклеофильного замещения по гидроксильным группам, реакции с участием карбонильной группы, реакции электрофильного замещения в ароматическое кольцо.
--	--

6. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Самостоятельная работа обучающихся направлена на углубленное изучение разделов и тем рабочей программы и предполагает изучение литературных источников, выполнение домашних заданий и проведение исследований разного характера. Работа основывается на анализе литературных источников и материалов, публикуемых в интернете, а также реальных речевых и языковых фактов, личных наблюдений. Также самостоятельная работа включает подготовку и анализ материалов по темам пропущенных занятий.

Самостоятельная работа по дисциплине включает следующие виды деятельности:

- работа с лекционным материалом, предусматривающая проработку конспекта лекций и учебной литературы;
- поиск (подбор) и обзор литературы, электронных источников информации по индивидуально заданной проблеме курса, написание доклада, исследовательской работы по заданной проблеме;
- выполнение задания по пропущенной или плохо усвоенной теме;
- самостоятельный поиск информации в Интернете и других источниках;
- выполнение домашней контрольной работы (решение заданий, выполнение упражнений);
- изучение материала, вынесенного на самостоятельную проработку (отдельные темы, параграфы);
- написание рефератов;
- подготовка к тестированию; подготовка к практическим занятиям; подготовка к экзамену.

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТА				
Код	Наименование разделов и тем/вид занятия	Часов	Компетенци	Литератур
СР.1.1.	Понятие фармакофора. Определение активной группы в рядах биологически активных веществ. Значение фармакокинетики	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.2.	Протеомика. Классификация белковых макробиомишений. Строение и функции.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.3.	Дизайн активных центров белковых макромишений. Основы компьютерного дизайна ЛП виртуальной фармакодинамикой.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.4.	Молекулярное моделирование. Трехмерная модель молекулы, как базовый элемент моделирования.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.5.	Молекулярный докинг. Принцип метода и его задачи. Программное сопровождение.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.

СР.1.6.	Молекулярная динамика. Принцип метода и его задачи. Программное сопровождение.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.7.	Хемогенетика. Функциональная геномика. Типы взаимодействий лекарств с ДНК.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.8.	Асимметрия биологических молекул.	1,8	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.9.	Современные представления о роли антиоксидантов.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.10.	Наноплатформы для адресной доставки лекарств.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.12.	Первичная модификация соединения-лидера. Биоизостерическая замена.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
СР.1.13.	Первичная модификация соединения-лидера. Гомологизация. Конформационное ограничение.	3	ОПК -1	7.2.4. 7.1.5. 7.3.
Всего:		37,8		

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА: КНИЖНЫЙ ВАРИАНТ

7.1.1. Попков, В. А. Общая химия : учебник / Жолнин А. В. Под ред. В. А. Попкова. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2012. - 400 с. - ISBN 978-5-9704-2108-6. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970421086.html>

7.1.2. Жолнин, А. В. Общая химия : учебник / А. В. Жолнин ; под ред. В. А. Попкова, А. В. Жолнина. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2014. - 400 с. - Режим доступа: www.studmedlib.ru

7.1.3. Оганесян, Э. Т. Органическая химия : учебник / Э. Т. Оганесян. – Ростов-на-Дону : Феникс, 2020. – 400 с. : ил. – (Высшее медицинское образование). – Режим доступа: www.studmedlib.ru

ЭЛЕКТРОННО-БИБЛИОТЕЧНАЯ СИСТЕМА

7.1.4. Чебышев, Н. В. Биология: учебное пособие/ Чебышев Н.В., Гринева Г.Г. - Москва: ГЭОТАР-Медиа, 2010.-416 с.-Режим доступа: по подписке- URL:<https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970416068.html>

7.1.5. Пехов А.П. Биология [Электронный ресурс]: медицинская биология, генетика и паразитология: учеб.для вузов.- 3-е изд., стер.- М.: ГЭОТАР.- Медиа, 2014. Режим доступа: www.studmedlib.ru

7.2. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА КНИЖНЫЙ ВАРИАНТ

7.2.1. Токсикологическая химия : учебник / А. В. Сыроешкин, Т. В. Плетенёва, О. В. Левицкая ; под ред. А. В. Сыроешкина. - 3-е изд. , перераб. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2022. - 512 с. -

ISBN 978-5-9704-6667-4. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://2.Мамонтов С.Г. Биология: учеб. / С.Г. Мамонтов, В.Б. Захаров, Т.А. Козлова.- М.: Академия, 2006.- 576 с.>

7.2.2. Сливкин, А. И. Фармацевтическая технология. Высокомолекулярные соединения в фармации и медицине / А. И. Сливкин [и др.] ; под ред. И. И. Красножа. - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2017. - 560 с. - ISBN 978-5-9704-3834-3. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970438343.html>

7.2.3. Скуридин, В. С. Методы и технологии получения радиофармпрепаратов : учебное пособие / В. С. Скуридин ; Национальный исследовательский Томский государственный университет. – Томск : Издательство Томского политехнического университета, 2013. – 140 с. : ил., табл., схем. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=442806>

7.2.4. Перельман, М. И. ХИМИОТЕРАПИЯ В ФТИЗИАТРИИ / Аксенова В. А. , Апт А. С. , Баринов В. С. и др. Под ред. М. И. Перельмана - Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2011. – Режим доступа: по подписке - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/970412329V0027.html>

ЭЛЕКТРОННО-БИБЛИОТЕЧНАЯ СИСТЕМА

7.2.5. <http://bibl.volgmed.ru/MegaPro/Web> – ЭБС ВолгГМУ (база данных изданий, созданных НПП и НС ВолгГМУ) (профессиональная база данных)

7.2.6. <https://e.lanbook.com> – сетевая электронная библиотека (СЭБ) (база данных на платформе ЭБС «Издательство Лань») (профессиональная база данных)

7.2.7. <https://www.books-up.ru> – Большая медицинская библиотека (база данных на платформе электронно-библиотечной системы ЭБС Букап) (профессиональная база данных)

7.2.8. <https://www.rosmedlib.ru/> – Консультант врача. Электронная медицинская библиотека (база данных профессиональной информации по широкому спектру врачебных специальностей) (профессиональная база данных)

7.2.9. <http://www.studentlibrary.ru/> – электронная библиотечная система «Консультант студента» (многопрофильная база данных) (профессиональная база данных)

7.2.10. <https://speclit.prof-y-lib.ru> – электронно-библиотечная система Спецлит (база данных с широким спектром учебной и научной литературы) (профессиональная база данных)

7.2.11. <https://urait.ru/> – образовательная платформа Юрайт (электронно-образовательная система с сервисами для эффективного обучения) (профессиональная база данных)

7.2.12. <http://dlib.eastview.com> – универсальная база электронных периодических изданий (профессиональная база данных)

7.2.13. <http://elibrary.ru> – электронная база электронных версий периодических изданий (профессиональная база данных)

7.2.14. <https://journals.eco-vector.com/index/search/category/784/> – электронные версии периодических изданий на платформе Эко-вектор (профессиональная база данных)

7.2.15. <http://www.consultant.ru/> – справочно-правовая система «Консультант-Плюс» (профессиональная база данных)

7.2.16. <https://grebennikon.ru> – электронная библиотека Издательского дома «Гребенников» (материалы по отраслям экономики и социологии) (профессиональная база данных)

7.2.17. <https://eduport-global.com/catalog/show/MedicalScience/8> – электронная библиотека англоязычной медицинской литературы (профессиональная база данных)

7.2.18. <http://www.consultant.ru/> - КонсультантПлюс. Инсталлированная база данных на сервер университета.

7.3 ЛИЦЕНЗИОННОЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Программа для ПЭВМ Microsoft Office 365. Договор с ООО СТК «ВЕРШИНА» №27122016-1 от 27 декабря 2016 г. Бессрочно.

2. Открытая лицензия Microsoft Open License: 66237142 OPEN 96197565ZZE1712. 2017. До 31.12.2017.

3. Открытая лицензия Microsoft Open License: 66432164 OPEN OPEN 96439360ZZE1802. 2018. До 31.12.2018.

4. Открытая лицензия Microsoft Open License: 68169617 OPEN OPEN 98108543ZZE1903. 2019. До 31.12.2019.

5. Программа для ПЭВМ Office Standard 2016. 200 (двести) лицензий OPEN 96197565ZZE1712. Бессрочно.

6. Программа для ПЭВМ VeralTest Professional 2.7 Электронная версия. Акт предоставления прав № IT178496 от 14.10.2015. Бессрочно.

7. Программа для ПЭВМ ABBYY Fine_Reader_14 FSRS-1401. Бессрочно.

8. Программа для ПЭВМ MOODLEe-Learning, eLearningServer, Гиперметод. Договор с ООО «Открытые технологии» 82/1 от 17 июля 2013 г. Бессрочно.

7.4 СОВРЕМЕННЫЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ СПРАВОЧНЫЕ СИСТЕМЫ

1. <https://www.rosmedlib.ru/> Консультант врача. Электронная медицинская библиотека (база данных профессиональной информации по широкому спектру врачебных специальностей) (профессиональная база данных)

2. <http://www.studentlibrary.ru/> электронная библиотечная система «Консультант студента» (многопрофильная база данных) (профессиональная база данных)

3. <https://speclit.profyt-lib.ru/> – электронно-библиотечная система Спецлит (база данных с широким спектром учебной и научной литературы) (профессиональная база данных)

4. <https://urait.ru/> – образовательная платформа Юрайт (электронно-образовательная система с сервисами для эффективного обучения) (профессиональная база данных)

5. <http://dlib.eastview.com> – универсальная база электронных периодических изданий (профессиональная база данных)

6. <http://elibrary.ru/> – электронная база электронных версий периодических изданий (профессиональная база данных)

7. Справочно-правовая система «Консультант Плюс» - Режим доступа: <http://www.consultant.ru/>

8. Информационно-правовой сервер «Гарант» <http://www.garant.ru/>

9. Научная электронная библиотека www.elibrary.ru

10. Российская государственная библиотека. - <http://www.rsl.ru>

11. Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов <http://school-collection.edu.ru/>

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в приложении №1 к рабочей программе дисциплины.

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

<p>Учебная аудитория для проведения учебных занятий (ауд. 307)</p>	<p><i>Учебная мебель:</i> стол островной из 3-х секций, стол островной из 3-х секций, стол островной из 3-х секций, стол островной из 3-х секций, стол островной из 3-х секций, стол письменный (офисный), стол островной из 4-х секций, стол островной из 4-х секций, шкаф вытяжной, шкаф вытяжной, стул «ИЗО».</p>
<p>Учебная аудитория для проведения учебных занятий (ауд. 309)</p>	<p><i>Учебная мебель:</i> стол письменный (офисный), стол химический пристенный из 4-х секций, стол химический пристенный из 4-х секций, стол химический пристенный из 4-х секций, шкаф вытяжной, шкаф вытяжной, штатив лабораторный для фронтальных работ ШФР-ММ (2 лапки, 3 кольца), огнетушитель ОУ-3, стол химический пристенный из 3-х секций, стол химический пристенный из 3-х секций, стол химический пристенный из 3-х секций, стол химический пристенный из 3-х секций, стол химический пристенный из 3-х секций, стол химический пристенный из 3-х секций, стол химический пристенный из 3-х секций, стул «ИЗО».</p>
<p>Учебная аудитория для проведения учебных занятий (ауд. 311)</p>	<p><i>Учебная мебель:</i> доска магнитно-меловая зеленая Elegance 90*150 см, стол островной из 3-х секций, стол химический пристенный из 4-х секций, стол химический пристенный из 4-х секций, шкаф вытяжной, стол пристенный, стол пристенный, стол физический массивный, стул «ИЗО».</p>

	<p><i>Технические средства обучения:</i> штатив лабораторный для фронтальных работ ШФР-ММ (2 лапки, 3 кольца), штатив лабораторный для фронтальных работ ШФР-ММ (2 лапки, 3 кольца), штатив лабораторный для фронтальных работ ШФР-ММ (2 лапки, 3 кольца), штатив лабораторный для фронтальных работ ШФР-ММ (2 лапки, 3 кольца), штатив лабораторный для фронтальных работ ШФР-ММ (2 лапки, 3 кольца).</p>
<p>Помещение для самостоятельной работы обучающихся (ауд. 304)</p>	<p><i>Учебная мебель:</i> стеллаж комбинированный для компьютера, стеллаж комбинированный для компьютера, стеллаж комбинированный для компьютера, стеллаж комбинированный со столом, холодильник Mitsubishi, кресло офисное на колесах, стол физический массивный, стол физический массивный, стул «ИЗО».</p> <p><i>Технические средства обучения:</i> автоматический детектор антиоксидантной активности, инфракрасный-фурье спектрометр, ФСМ 1201 (П23360012947), компьютер Intel Core i9 LCD, компьютер Intel Pentium LGA 775, мешалка магнитная, монитор LCD 17" Acer V173 Dob black, моноблок тип 1 Lenovo C20-00 F0BB00Y4RK", моноблок тип 1 Lenovo S200z 10HA0012RU, мФУ HP LaserJet Pro M 1217 nfw, мФУ HP LaserJet Pro M426dw, облучатель УФС-254/365, персональный компьютер в сборе (монитор ж/к BENQ17, мышь, клавиатура, системный блок), поляриметр круговой СМ-3, РН-410 лаборат-й базовый+комбинир. рН-электрод+штатив+ магнитные мешалка+станд. титр, системный блок в составе DEPO Neos 260MN W7 P64/SM/G840/1, спектрофотометр СФ-103 2.3.360012960, Калькулятор Citizen 12 разр. D-312.</p>
<p>Помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования (ауд.361)</p>	<p>Гардероб одностворчатый 550*365*1975ор, программное обеспечение к СФ-103,</p>

	степлер KW-trio 5000, брошюровочный до 240 листов, стол островной из 4-х секций, холодильник Индезит, шкаф высокий узкий 403*365*1795 ор., шкаф высокий широкий с дверками 770*365*1975, шкаф металлический, весы лабораторные электронные до 50 гр., стол физический массивный, стул «ИЗО».
--	--

10. ОСОБЕННОСТИ ВЫПОЛНЕНИЯ ЗАДАНИЙ ОБУЧАЮЩИМИСЯ-ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ (ПРИ НАЛИЧИИ)

Особые условия обучения и направления работы с инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья (далее обучающихся с ограниченными возможностями здоровья) определены на основании:

- Закона РФ от 29.12.2012г. № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации»;
- Закона РФ от 24.11.1995г. № 181-ФЗ «О социальной защите инвалидов в Российской Федерации»;
- Приказа Минобрнауки России от 06.04.2021 N 245 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры»;
- методических рекомендаций по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утв. Минобрнауки России 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Под специальными условиями для получения образования обучающихся с ограниченными возможностями здоровья понимаются условия обучения, воспитания и развития таких обучающихся, включающие в себя использование адаптированных образовательных программ и методов обучения и воспитания, специальных учебников, учебных пособий и дидактических материалов, специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования, предоставление услуг ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь, проведение групповых и индивидуальных коррекционных занятий, обеспечение доступа в здания вуза и другие условия, без которых невозможно или затруднено освоение образовательных программ обучающимися с ограниченными возможностями здоровья.

В целях доступности изучения дисциплины инвалидами и обучающимися с ограниченными возможностями здоровья организацией обеспечивается:

1. Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по зрению:
 - наличие альтернативной версии официального сайта организации в сети «Интернет» для слабовидящих;
 - размещение в доступных для обучающихся, являющихся слепыми или слабовидящими, местах и в адаптированной форме (с учетом их особых потребностей)

справочной информации (информация должна быть выполнена крупным рельефно-контрастным шрифтом (на белом или желтом фоне) и продублирована шрифтом Брайля);

- присутствие ассистента, оказывающего обучающемуся необходимую помощь;
- обеспечение выпуска альтернативных форматов печатных материалов (крупный шрифт или аудиофайлы);
- обеспечение доступа обучающегося, являющегося слепым и использующего собаку-поводыря, к зданию организации;

2. Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по слуху:

- дублирование звуковой справочной информации визуальной (установка мониторов с возможностью трансляции субтитров (мониторы, их размеры и количество необходимо определять с учетом размеров помещения);

– обеспечение надлежащими звуковыми средствами воспроизведения информации:

3. Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата. Материально-технические условия обеспечивают возможность беспрепятственного доступа обучающихся в помещения организации, а также пребывания в указанных помещениях (наличие пандусов, поручней, расширенных дверных проемов, лифтов, локальное понижение стоек-барьеров: наличие специальных кресел и других приспособлений).

Обучение лиц организовано как инклюзивно, так и в отдельных группах.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Этапы формирования компетенций в процессе освоения ОПОП прямо связаны с местом дисциплин в образовательной программе. Каждый этап формирования компетенции характеризуется определенными знаниями, умениями и навыками и (или) опытом профессиональной деятельности, которые оцениваются в процессе текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по дисциплине (практике) и в процессе государственной итоговой аттестации. Оценочные материалы включают в себя контрольные задания и (или) вопросы, которые могут быть предложены обучающемуся в рамках текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине. Указанные планируемые задания и (или) вопросы позволяют оценить достижение обучающимися планируемых результатов обучения по дисциплине, установленных в соответствующей рабочей программе дисциплины, а также сформированность компетенций, установленных в соответствии с общей характеристикой основной профессиональной образовательной программы. На этапе текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине показателями оценивания уровня сформированности компетенций являются результаты устных и письменных опросов, выполнение практических заданий, решения тестовых заданий. Итоговая оценка сформированности компетенций определяется в период государственной итоговой аттестации.

Описание показателей и критериев оценивания компетенций

Показатели оценивания	Критерии оценивания компетенций	Шкала оценивания
Понимание смысла компетенции и	Имеет базовые общие знания в рамках диапазона выделенных задач	Минимальный уровень
	Понимает факты, принципы, процессы, общие понятия в пределах области исследования. В большинстве случаев способен выявить достоверные источники информации, обработать, анализировать информацию.	Базовый уровень
Освоение компетенции и в рамках изучения дисциплины	Имеет фактические и теоретические знания в пределах области исследования с пониманием границ применимости	Высокий уровень
	Наличие основных умений, требуемых для выполнения простых задач. Способен применять только типичные, наиболее часто встречающиеся приемы по конкретной сформулированной (выделенной) задаче	Минимальный уровень
	Имеет диапазон практических умений, требуемых для решения определенных проблем в области исследования. В большинстве случаев способен выявить достоверные источники информации, обработать, анализировать информацию.	Базовый уровень
	Имеет широкий диапазон практических умений, требуемых для развития творческих решений, абстрагирования проблем. Способен выявлять проблемы и умеет находить способы решения, применяя современные методы и технологии.	Высокий уровень

Способность применять на практике знания, полученные в ходе изучения дисциплины	Способен работать при прямом наблюдении. Способен применять теоретические знания к решению конкретных задач. Может взять на себя ответственность за завершение задач в исследовании, приспосабливает свое поведение к обстоятельствам в решении проблем. Затрудняется в решении сложных, неординарных проблем, не выделяет типичных ошибок и возможных сложностей при решении той или иной проблемы Способен контролировать работу, проводить оценку, совершенствовать действия работы. Умеет выбрать эффективный прием решения задач по возникающим проблемам.	Минимальный уровень Базовый уровень Высокий уровень
---	--	---

I. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ

Наименование компетенции	Индикатор достижения компетенции	Результаты обучения
ОПК-1. Способен использовать основные биологические, физико-химические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	ИДОПК-1.-1 Применяет основные биологические методы анализа для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств и лекарственного растительного сырья ИДОПК-1.-2 Применяет основные физико-химические и химические методы анализа для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, лекарственного растительного сырья и биологических объектов ИДОПК-1.-3 Применяет основные методы физико-химического анализа в изготовлении лекарственных препаратов ИДОПК-1.-4 Применяет математические методы и осуществляет математическую обработку данных, полученных в ходе разработки лекарственных средств, а также исследований и экспертизы лекарственных средств, лекарственного растительного сырья и биологических объектов	Знает основные химические и медицинские категории и понятия;
ПК-1. Способен изготавливать лекарственные препараты и принимать участие в технологии производства готовых лекарственных средств, биологических и ветеринарных лекарственных средств,	1.1 Способен подготовить рабочее место, технологическое оборудование, лекарственные и вспомогательные вещества к работе, провести выбор оптимальной лекарственной формы, выбирать оптимальную технологию и составляет макет лабораторного регламента, а также подобрать и рассчитать количества лекарственных и вспомогательных веществ с учетом влияния биофармацевтических факторов и совместимости.	

ПК-5. Способен принимать участие в проведении исследований в области разработки методик для целей химико-токсикологического анализа и выполнять клинические лабораторные исследования третьей категории сложности, в том числе на основе внедрения новых методов и методик исследования	5.1. Способен проводить забор и подготовку проб биообъектов для химико-токсикологического анализа, проводить анализ токсических веществ, используя комплекс современных высокотехнологичных физико-химических, биологических и химических методов анализа, скрининговые методы современных токсикологически значимых соединений	
ПК 6. Способен принимать участие в проведении исследований в области оценки эффективности и безопасности лекарственных средств	6.1 Способен проводить изучение фармакологической активности и других видов активности различных соединений на лабораторных животных	
ПК 7. Способен участвовать в проведении научных исследований Способен к анализу и публичному представлению научных данных	7.1 Способен проводить сбор и изучение современной научной литературы 7.2 Способен формулировать цели и задачи исследования, планировать эксперимент, проводить исследование, статистическую обработку экспериментальных и аналитических данных 7.3 Формулирует выводы и делает обоснованное заключение по результатам исследования	

ТИПОВЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ СФОРМИРОВАННОСТИ ЗНАНИЙ

1. ВОПРОСЫ ДЛЯ УСТНОГО ОПРОСА НА ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЯХ

Вопросы	Соответствующий индикатор достижения компетенции	Шаблоны ответа (ответ должен быть лаконичным, кратким, не более 20 слов)
1. Охарактеризуйте общие свойства ферментов как белковых структур.	ОПК-1.	Общие свойства ферментов как белковых структур а) амфотерность; б) электрофоретическая подвижность; в) способность осаждаться из растворов путем высаливания; г) неспособность

		проходить через полупроницаемые мембраны; д) способность к кристаллизации.
2. Однако активные центры некоторых ферментов не являются жесткой структурой и могут модифицировать свою форму в процессе взаимодействия с субстратом.	ОПК-1.	У этих ферментов активный центр становится комплементарным субстрату только во время его связывания (это не «ключ-замок», а «рука – перчатка»).
3. Роль ферментов в жизнедеятельности организма.	ОПК-1.	Согласно современным представлениям, ферменты являются функциональными единицами клеточного метаболизма
4. Дайте характеристику пероксидных радикалов (ROO [*]).	ОПК-1.	Пероксидные радикалы (ROO [*]). образуются при взаимодействии O ₂ с органическими радикалами. Например, липидный пероксил радикал (диоксил) LOO [*] . Имеет более низкую окислительную способность по сравнению с OH [*] , но более высокую диффузию.
5. Объясните роль активной формы кислорода (АФК) как вторичных мессенджеров.	ОПК-1.	Роль АФК как вторичных мессенджеров (посредников)- в физиологическим концентрациях АФК регулирует иммунные реакции, клеточную пролиферацию и процессы репарации ДНК за счет активации цАМФ-зависимых реакций.
6. Какие органы отвечают за метаболизм	ОПК-1.	Основной орган метаболизма – печень. Метаболизм также может протекать в почках, легких, коже, скелетных мышцах, кишечнике.
7.Что такое пролекарства.	ОПК-1.	Пролекарства - это фармакологически неактивные соединения, которые превращаются в свои активные формы в результате метаболизма. Неактивные пролекарства быстро превращаются в активные метаболиты.
8. Дайте определение понятию молекулярный докинг.	ОПК-1.	Молекулярный докинг (англ. Molecular docking) — метод молекулярного моделирования, позволяющий предсказать наиболее выгодную конформацию молекулы (лиганда) для образования устойчивого комплекса с рецептором.

<p>9. При проведении молекулярного докинга антиадренергических препаратов в отношении β1-адренорецепторов были получены следующие данные. Определите какое из соединений обладает более выраженным сродством к мишени?</p> <table border="1" data-bbox="212 439 600 741"> <thead> <tr> <th>Препарат</th> <th>Энергия связывания ккал/моль</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Атенолол</td> <td>-30,5</td> </tr> <tr> <td>Ацебутолол</td> <td>-25,4</td> </tr> <tr> <td>Метопролол</td> <td>-15,7</td> </tr> <tr> <td>Соталол</td> <td>-45,9</td> </tr> <tr> <td>Тимолол</td> <td>-50,4</td> </tr> </tbody> </table>	Препарат	Энергия связывания ккал/моль	Атенолол	-30,5	Ацебутолол	-25,4	Метопролол	-15,7	Соталол	-45,9	Тимолол	-50,4	<p>ОПК-1.</p>	<p>Наиболее выраженным сродством к мишени (β1-адренорецептору) обладает тимолол, т.к. у него наибольшая по модулю энергия связывания с рецептором, т.е. он является самым эффективным из приведенных выше препаратов.</p>
Препарат	Энергия связывания ккал/моль													
Атенолол	-30,5													
Ацебутолол	-25,4													
Метопролол	-15,7													
Соталол	-45,9													
Тимолол	-50,4													
<p>10.К какому классу по механизму действия относится аскорбиновая кислота (АК)?</p>	<p>ОПК-1.</p>	<p>АК отвечает критериям первичного антиоксиданта: имеет невысокий восстановительный потенциал, то есть является донором электронов, а возникающий при ее окислении свободный радикал обладает низкой реактивностью.</p>												
<p>11.Что такое фармакофор?</p>	<p>ОПК-1.</p>	<p>Фармакофор — это набор пространственных и электронных признаков, необходимых для обеспечения оптимальных супрамолекулярных взаимодействий со специфической биологической мишенью, которые могут вызывать (или блокировать) её биологический ответ.</p>												
<p>12. Условия подобия лекарству (drug-likeness) - <i>правило пяти Липинского</i>, согласно которому соединение, чтобы «быть похожим» на лекарство, должно:</p>		<ul style="list-style-type: none"> - Иметь менее пяти атомов-доноров водородной связи - Обладать молекулярным весом менее 500 (через барьеры не пройдет); - Иметь липофильность ($\log P$ — коэффициент распределения вещества на границе раздела вода-октанол) менее 5 - Иметь суммарно не более 10 атомов азота и кислорода 												
<p>13. привести дескрипторы, которые используют для предсказания физиологической активности в QSAR .</p>	<p>ОПК-1.</p>	<p>Для предсказания физиологической активности в QSAR обычно используют следующие дескрипторы: электронные эффекты, стерические особенности</p>												

		структуры (играют важную роль при оценке прочности связывания исследуемого соединения с биомишенью), липофильность (способность растворяться в жирах характеризует способность лекарства преодолеть клеточные мембраны).
14. Что такое дескриптор?	ОПК-1.	Дескриптор - это какая либо величина, которая характеризует структуру органического соединения и отражающая какие-то важные черты этой структуры (молекулярный вес, число определённых атомов, связей или групп, молекулярный объём, частичные заряды на атомах.
15. На основании данных таблицы прогноза SwissADME сделайте вывод о способности вещества проникать в клетки путем пассивной диффузии. Липофильность Log Po / w (iLOGP) 1.98 Log Po / w (XLOGP3) 3.83 Log Po / w (WLOGP) 2.61 Log Po / w (MLOGP) 2.81 Log Po/w (SILICOS-IT) 2.43 Po / w 2.73	ОПК-1.	Если коэффициент распределения будет >1, то вещество липофильное. В данном примере коэффициент распределения октанол/вода равен 2,73, поэтому вещество – липофильно и может проникать в клетку пассивной диффузией.

КРИТЕРИИ И ШКАЛА ОЦЕНИВАНИЯ УСТНОГО ОПРОСА

Оценка за ответ	Критерии
Отлично	<p>выставляется обучающемуся, если:</p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; - исчерпывающее, последовательно, четко и логически излагает теоретический материал; - свободно справляется с решением задач, - использует в ответе дополнительный материал; - все задания, предусмотренные учебной программой выполнены; - анализирует полученные результаты; - проявляет самостоятельность при трактовке и обосновании выводов
Хорошо	<p>выставляется обучающемуся, если:</p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретическое содержание курса освоено полностью; - необходимые практические компетенции в основном сформированы; - все предусмотренные программой обучения практические задания выполнены, но в них имеются ошибки и неточности; - при ответе на поставленные вопросы обучающийся не отвечает аргументировано и полно. - знает твердо лекционный материал, грамотно и по существу отвечает на основные понятия.

Удовлетворительно	<p>выставляет обучающемуся, если:</p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретическое содержание курса освоено частично, но проблемы не носят существенного характера; - большинство предусмотренных учебной программой заданий выполнено, но допускаются не точности в определении формулировки; - наблюдается нарушение логической последовательности.
Неудовлетворительно	<p>выставляет обучающемуся, если:</p> <ul style="list-style-type: none"> - не знает значительной части программного материала; - допускает существенные ошибки; - так же не сформированы практические компетенции; - отказ от ответа или отсутствие ответа.

2. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ (Тестовые задания).

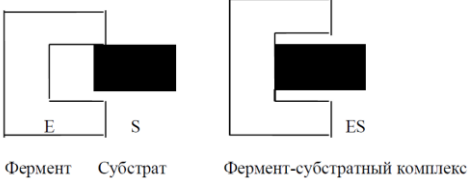
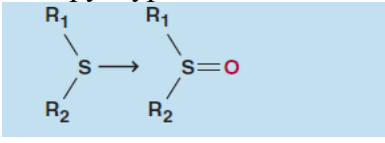
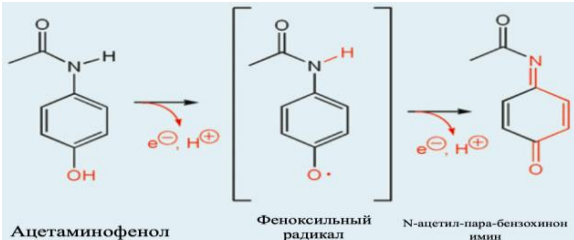
2.1. ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

Содержание тестовых заданий	Индикатор достижения компетенции	Правильный ответ
<p>1. В задании только один ответ является верным. Напишите букву, соответствующую правильному ответу. Радикал ONOO^- называется:</p> <ul style="list-style-type: none"> а) диоксид азота; б) пероксинитрит- ион; в) монооксид азота; г) нитрозил анион. 	ОПК-1.	б
<p>2. В задании только один ответ является верным. Напишите букву, соответствующую правильному ответу. Выберите из следующих соединений радикал – триоксид (-1) озонид:</p> <ul style="list-style-type: none"> а) HOO^-; б) ROOH; в) $\bullet\text{OOO}$; г) HO^-; д) $\text{RO}\bullet$. 	ОПК-1.	в
<p>3. В задании только один ответ является верным. Напишите букву, соответствующую правильному ответу. Выберите чем отличаются ферменты от химических катализаторов:</p> <ul style="list-style-type: none"> а) не расходуются в ходе катализируемой ими реакции и выходят из неё в неизменном виде; б) они проявляют чрезвычайно высокую каталитическую активность; в) не могут инициировать реакцию, а лишь изменяют скорость химических превращений; г) не смещают химического равновесия. 	ОПК-1.	б
<p>4. В задании только один ответ является верным. Напишите букву, соответствующую правильному ответу. При проведении молекулярного докинга антихолинэстеразных средств в отношении ацетилхолинэстеразы были получены следующие данные. Определите какое из соединений обладает</p>	ОПК-1.	а

<p>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.</p>		
<p>5. В задании только один ответ является верным. Напишите букву, соответствующую правильному ответу. Выберите биоизомер <i>n</i>-аминобензолсульфаниламиду: а) бензойная кислота; б) <i>n</i>-аминобензойная кислота; в) пенициллин; г) анилин.</p>	ОПК-1.	6
<p>6. В задании выберите только одновалентные классические (био) изомеры: 1) CN; 2) NH; 3) OCHF₂; 4) CH; 5) N.</p>	ОПК-1.	1,3
<p>7. В задании выберите правильную последовательность ответов. Для проявления биологической активности липофильность в ряду сходных по структуре веществ должна отвечать определенному оптимуму, 1) фенobarбитала - 5,9, 2) морфина – 0,4; 3) этанола – 0,03; 4) ацетамида - -1,16; 5) диэтилового эфира 0,83.</p>	ОПК-1.	1,2,3,4,5
<p>8. В задании выберите правильную последовательность ответов. Из предложенного перечня дескрипторов выберите топологические индексы (молекулярные графы): 1) молярная рефракция; 4) дипольные моменты; 2) индекс Хосои; 5) индекс Винера, 3) индекс Рандича;</p>	ОПК-1.	2,3,5
<p>9. В задании выберите правильную последовательность ответов. Из предложенного перечня дескрипторов выберите физико-химические дескрипторы: 1) индекс Винера,); 3) липофильность; 2) молярная рефракция; 4) индекс Рандича; 5) частичные заряды на атомах.</p>	ОПК-1.	2,3
<p>10. В задании выберите правильную последовательность ответов. Из предложенного перечня дескрипторов выберите квантово-химические дескрипторы: 1) частичные заряды на атомах; 3) индекс Винера; 2) молекулярный вес; 4) молярная рефракция; 5) частичные порядки связей.</p>	ОПК-1.	1,5

1.2.1. ВИЗУАЛИЗИРОВАННЫЕ ТЕСТОВЫЕ ЗАДАНИЯ

Содержание тестовых заданий	Индикатор достижения компетенции	Правильный ответ
1. Назовите взаимодействия фермента с субстратом;	ОПК-1.	«ключ – замок».

 <p style="text-align: center;">Фермент Субстрат Фермент-субстратный комплекс</p>		
<p>2. Назовите реакцию, катализируемую оксидоредуктазой.</p> $\begin{array}{ccc} \text{CH}_3\text{-CH(NH}_3^+\text{)-COO}^- + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} & \xrightarrow{\text{КФ 1.4.3.2}} & \text{CH}_3\text{-CO-COO}^- + \text{H}_2\text{O}_2 + \text{NH}_4^+ \\ \text{L-Аланин} & & \text{Пируват} \end{array}$	ОПК-1.	Окисление α-аминокислот кислородом без включения в их молекулы атомов кислорода из молекулы кислорода.
<p>3. Укажите класс реакции -а, лекарственный субстрат -б для структурного изменения.</p> 	ОПК-1.	а- S-окисление, б- Тиоридазин, циметидин, хлорпромазин
<p>4. Укажите класс реакции -а, лекарственный субстрат -б для структурного изменения.</p> $\text{RN}=\text{NR}_1 \rightarrow \text{RNH}-\text{NHR}_1 \rightarrow \text{RNH}_2 + \text{R}_1\text{NH}_2$	ОПК-1.	а-восстановление азосоединений: б-пронтосил, тартазин
<p>5. Укажите какому процессу соответствует приведенная ниже схема:</p>  <p style="text-align: center;">Ацетаминофенол Феноксильный радикал N-ацетил-пара-бензохинон имин</p>	ОПК-1.	Реакции образования токсичных метаболитов ацетаминофенола (парацетамола).

КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ ТЕСТИРОВАНИЯ

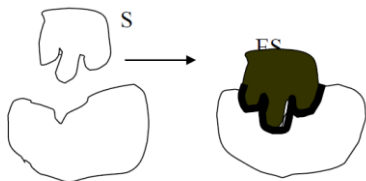
Оценка по 100-балльной системе	Оценка по системе «зачтено - не зачтено»	Оценка по 5-балльной системе		Оценка по ECTS
96-100	зачтено	5	отлично	A
91-95	зачтено			B
81-90	зачтено	4	хорошо	C
76-80	зачтено			D
61-75	зачтено	3	удовлетворительно	E
41-60	не зачтено			Fx
0-40	не зачтено	2	неудовлетворительно	F


2. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Типовые задания, направленные на формирование профессиональных умений

Наименование компетенции	Индикатор достижения компетенции	Результаты обучения
УК-10. Способен принимать обоснованные экономические решения в различных областях жизнедеятельности	УК 10.1. Использует основы экономической культуры и финансовой грамотности в различных областях жизнедеятельности).	Умеет применять полученные теоретические знания при анализе конкретных экономических ситуаций и решении практических задач

3.1. ТИПОВЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ К ЗАЧЕТУ С ОЦЕНКОЙ

Вопросы	Соответствующий индикатор достижения компетенции	Шаблоны ответа (ответ должен быть лаконичным, кратким, не более 20 слов)
1. Приведите заменители карбоксильной группы.	ОПК -1	Карбоксильная группа может быть заменена на функциональные группы: CONHOH; CONHCN; CONHSO ₃ R
2. Изобразите взаимодействия фермента с субстратом «рука – перчатка».	ОПК -1	
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 Бромокриптин -50,3 Проноран -20,7 Прамипексол -55,6 Ропинирол -62,7 Леводопа -17,9	ОПК -1	Ропинирол
4. Поясните, что такое молекулярное подобие.	ОПК -1	Молекулярное подобие (или химическое подобие, chemical similarity) — это близость, сходство, подобие структур химических соединений. В качестве количественной меры молекулярного подобия часто рассматривается величина, возрастающая с уменьшением расстояния между химическими соединениями в

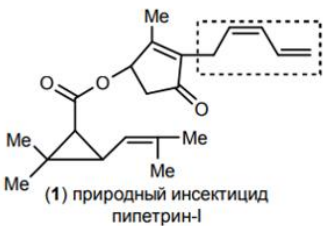
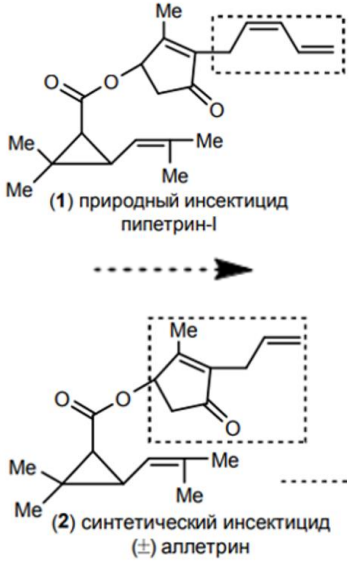
		дескрипторном пространстве.
5. Приведите схему ферментного гидролиза и высвобождение осельтамивира из его пролекарства осельтамивира карбоксилата.	ОПК -1	 <p>Осельтамивира карбоксилат → Осельтамивир</p>
6. Жидкофазный синтез 7. Преимущества	ОПК -1	<ol style="list-style-type: none"> 1. Жидкофазный синтез возможен при использовании всех известных синтетических методов без каких либо ограничений 2. Реакция проходит в гомогенных условиях 3. Можно легко использовать нагревание 4. Реакцию можно контролировать 5. Возможна очистка и анализ продуктов реакции на каждой стадии
8. Дайте определение понятию пролекарства.	ОПК -1	<p>Пролекарства - это фармакологически неактивные соединения, которые превращаются в свои активные формы в результате метаболизма. Неактивные пролекарства быстро превращаются в активные метаболиты, часто путем гидролиза сложноэфирной или амидной связи (например, эналаприл при гидролизе образует активный эналаприлат).</p>
9. Приведите реакцию трансметилирования пиридина под катализом метилтрансферазы	ОПК -1	 <p>Пиридин + S-аденозилмететин → Ион N-метилпиридиниума</p> <p>Токсичен</p>

4. ТИПОВЫЕ ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАДАНИЯ, НАПРАВЛЕННЫЕ НА ФОРМИРОВАНИЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ НАВЫКОВ, ВЛАДЕНИЙ

Результаты обучения	
Владеет методами и приемами анализа экономических явлений и процессов с помощью стандартных теоретических и эконометрических моделей;	

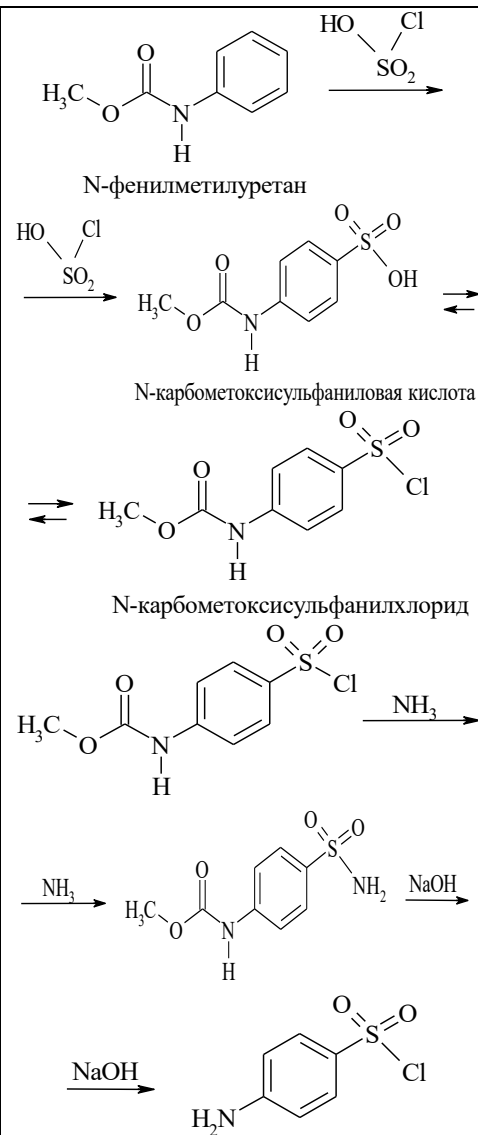
4.1.ТИПОВЫЕ СИТУАЦИОННЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ К ЗАЧЕТУ С ОЦЕНКОЙ

Вопросы	Соответствующий индикатор достижения компетенции	Шаблоны ответа (ответ должен быть лаконичным, кратким, не более 20 строк)
По мнению многих исследователей, хелатирование	ОПК-1.	По мнению многих исследователей, хелатирование металлов является наиболее

<p>металлов является наиболее эффективным путем подавления процессов перекисного окисления флавоноидами. Объясните антиоксидантное действие флавоноидов..</p>		<p>эффективным путем подавления процессов перекисного окисления флавоноидами. Более того, при образовании комплексов с металлами переменной валентности, например Fe(II), Fe(III), Cu(I), Cu(II) и др., способность флавоноидов нейтрализовать свободные радикалы возрастает. Этот эффект достигается благодаря тому, что комплексы флавоноидов с металлами обладают супероксиддисмутазной активностью.</p>
<p>1. Типичным примером биоизостеризма служит постепенная химическая модификация природного высокоэффективного, но малоустойчивого химически и фотохимически, инсектицида пиретрина-I (1), которая привела к формированию целого семейства эффективных и стабильных пиретроидных инсектицидов с тем же механизмом блокады передачи нервных импульсов у вредных насекомых.</p> <div style="text-align: center;">  <p>(1) природный инсектицид пиретрин-I</p> </div> <p>Первое поколение синтетических пиретроидных инсектицидов появилось после замены в спиртовой компоненте природного пиретрина I пентадиенильного фрагмента сначала на химически более устойчивый биоизостерный пропенильный (аллетрин, 2). Приведите схему замены биоизостера.</p>	<p>ОПК-1.</p>	<div style="text-align: center;">  <p>(1) природный инсектицид пиретрин-I</p> <p>(2) синтетический инсектицид (±) аллетрин</p> </div>

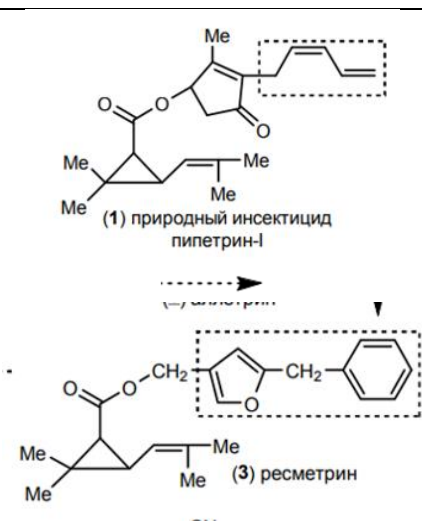
2. Когда Эрнест Фурну из Института Пастера показал, что сульфаниламид является активным метаболитом после распада вещества под названием Prontosil (пронтозил или красный стрептоцид - антибактериальный препарат, широко используемый в первой половине 20 века) в организме, он открыл новую главу в области медицинской химии. Prontosil - это краситель, который был изготовлен немецкими производителями химического концерна IG Farben. Как оказалось, Prontosil ингибирует рост стрептококков у мышей. Когда доктор компании, дочь Герхарда Домагга, заразилась инфекцией, ее жизнь была спасена пероральной дозой пронтозила. Несмотря на то, что это было отчаянной мерой, это не только обеспечило ее выздоровление, но и получение Домаггом Нобелевской премии по медицине и физиологии. Открытие эффективности сульфаниламида привело к поиску подобных соединений и методам их синтеза. Впервые в нашей стране сульфаниламид был синтезирован О.Ю.Магидсоном и М.В.Рубцовым из ацетанилида. Предложите оптимальную схему получения стрептоцида из ацетанилида.

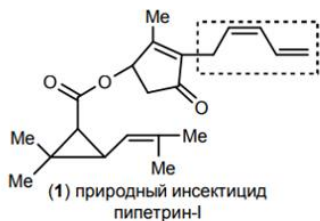
ОПК-1.



3. Типичным примером биоизостеризма служит постепенная химическая модификация природного высокоэффективного, но малоустойчивого химически и фотохимически, инсектицида пиретрина-I (1), которая привела к формированию целого семейства эффективных и стабильных пиретроидных инсектицидов с тем же механизмом блокады передачи нервных импульсов у вредных насекомых.

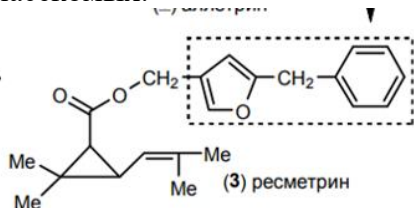
ОПК-1.





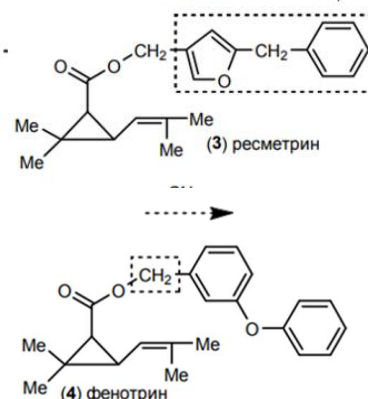
Второе поколение синтетических пиретроидных инсектицидов появилось в результате “хирургической” операции: вместо вырезанной цикlopентеноновой части молекулы пиретрина I (1) провели химическую имплантацию фурильного фрагмента, а винильную группу заменили на его биоизоостерный фенильный радикал. В результате был получен высокоактивный ещё более устойчивый к действию света инсектицид ресметрин (3). Приведите схему замены биоизоостера.


4. Типичным примером биоизоостеризма служит постепенная химическая модификация синтетического пиретроидного инсектицида ресметрина, которая привела к новому поколению семейства эффективных и стабильных пиретроидных инсектицидов с тем же механизмом блокады передачи нервных импульсов у вредных насекомых.



Получение третьего и четвертого поколений синтетических пиретроидных инсектицидов основано на биоизоостерном изменении фенотрин 4. Фенотрин 4 был получен в результате замены в молекуле ресметрина ядра фурана

ОПК-1.



<p>на биоизоостерное ему бензольное кольцо.</p>																																			
<p>5. Одно из критериев правила Липински гласит «В молекуле должно быть: не более пяти доноров водородной связи, не более 10 акцепторов водородной связи (атомов азота и кислорода). Каким образом можно рассчитать соответствие этому критерию молекулы аскорбиновой кислоты?</p> 	<p>ОПК-1.</p>	<p>Примеры расчета количества водородных связей в органических соединениях приведены в таблице.</p> <table border="1" data-bbox="1013 376 1481 645"> <thead> <tr> <th>Функциональная группа</th> <th>Донор водородной связи</th> <th>Акцептор водородной связи</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Гидроксил</td> <td>1 (OH)</td> <td>1 (O)</td> </tr> <tr> <td>Карбоксильная кислота</td> <td>1 (OH)</td> <td>2 (2 O)</td> </tr> <tr> <td>-C(O)-N-R₂</td> <td>0</td> <td>2 (N, O)</td> </tr> <tr> <td>Первичный амин</td> <td>2 (NH₂)</td> <td>1 (N)</td> </tr> <tr> <td>Вторичный амин</td> <td>1 (NH)</td> <td>1 (N)</td> </tr> <tr> <td>Альдегид</td> <td>0</td> <td>1 (O)</td> </tr> <tr> <td>Сл. эфир</td> <td>0</td> <td>2 (O)</td> </tr> <tr> <td>Пр. эфир</td> <td>0</td> <td>1 (O)</td> </tr> <tr> <td>Нитрил</td> <td>0</td> <td>1 (N)</td> </tr> <tr> <td>Пиридин</td> <td>0</td> <td>1 (N)</td> </tr> </tbody> </table> <p>В молекуле аскорбиновой кислоты число акцепторов водородных связей 6, а число доноров водородных связей 4.</p>	Функциональная группа	Донор водородной связи	Акцептор водородной связи	Гидроксил	1 (OH)	1 (O)	Карбоксильная кислота	1 (OH)	2 (2 O)	-C(O)-N-R ₂	0	2 (N, O)	Первичный амин	2 (NH ₂)	1 (N)	Вторичный амин	1 (NH)	1 (N)	Альдегид	0	1 (O)	Сл. эфир	0	2 (O)	Пр. эфир	0	1 (O)	Нитрил	0	1 (N)	Пиридин	0	1 (N)
Функциональная группа	Донор водородной связи	Акцептор водородной связи																																	
Гидроксил	1 (OH)	1 (O)																																	
Карбоксильная кислота	1 (OH)	2 (2 O)																																	
-C(O)-N-R ₂	0	2 (N, O)																																	
Первичный амин	2 (NH ₂)	1 (N)																																	
Вторичный амин	1 (NH)	1 (N)																																	
Альдегид	0	1 (O)																																	
Сл. эфир	0	2 (O)																																	
Пр. эфир	0	1 (O)																																	
Нитрил	0	1 (N)																																	
Пиридин	0	1 (N)																																	
<p>6. Специалист по основам дизайна получил задание объяснить влияние наличия водородных связей на биодоступность лекарственных средств.</p>	<p>ОПК-1.</p>	<p>Наличие водородных связей между молекулами лекарственного средства и воды. увеличивают растворимость в воде. Таким образом, увеличение количества водородных связей снижает перераспределение ЛВ из водной фазы в двухслойную липидную мембрану для проникновения путем пассивной диффузии.</p>																																	
<p>7. Специалист по основам дизайна получил задание рассчитать все возможные дипептиды, которые можно синтезировать из пяти различных аминокислот.</p>	<p>ОПК-1.</p>	<p><u>25 возможных дипептидов.</u></p> <p>Gly - Gly Ala - Gly Phe - Gly Val - Gly Ser - Gly Gly - Ala Ala - Ala Phe - Ala Val - Ala Ser - Ala Gly - Phe Ala - Phe Phe - Phe Val - Phe Ser - Phe Gly - Val Ala - Val Phe - Val Val - Val Ser - Val Gly - Ser Ala - Ser Phe - Ser Val - Ser Ser - Ser</p>																																	
<p>8. Специалист по основам дизайна получил задание ответить на вопрос: сколько гранул необходимо для комбинаторного синтеза возможных декапептидов.</p>	<p>ОПК-1.</p>	<p>Комбинаторный синтез позволяет синтезировать 10 240 миллиардов возможных декапептидов. По статистическим причинам число гранул должно превышать число целевых молекул в десять раз. И для того, чтобы сделать полную библиотеку дипептидов необходимо использовать их весом 8,4 мг. Для создания полной библиотеки тетрапептидов необходимо иметь 3,4 г каждого. Однако, для того</p>																																	

		чтобы сделать полную библиотеку декапептидов вам необходимо 215,3 тонны.
9. Почему прогабид относится к пролекарству?	ОПК-1.	Иминопроизводное гамма-аминомасляной кислоты (ГАМК) прогабид является пролекарством, которое в отличие от ГАМК приобретает липофильность, позволяющую проникать в мозг через гематоэнцефалический барьер (ГЭБ), где подвергается биохимическому гидролизу с образованием эндогенной ГАМК, которая благодаря оказывает антиконвульсантное действие, что используется как для монотерапии, так и для дополнительного препарата при лечении эпилепсии.
10. Специалиста по основам дизайна попросили пояснить сущность понятия QSAR.	ОПК-1.	Аббревиатура QSAR является сокращением от английского Quantitative Structure Activity Relationships, что в переводе на русский язык обозначает Количественное Соотношение Структура Активность. Построение моделей, позволяющих по структурам химических соединений предсказывать их разнообразные свойства. При качественном описании соотношений между структурами химических соединений и их биологической активностью употребляют англоязычный термин Structure-Activity Relationship (SAR).
11. Специалист по основам дизайна получил задание установления характеристик лиганда по структуре биомишени.	ОПК-1.	Если структура мишени известна, а структуру её лиганда не известна, учёные используются подход называемый de novo дизайн. Создается виртуальная пространственную модель молекулы-мишени (3 D-модель), в том числе той её полости, с которой должно связываться лекарство. Далее производят виртуальное совмещение этой

		<p>полости с различными молекулами — кандидатами на роль лидера – так называемый „докинг“ (от англ. docking – стыковка). Ситуация замечательна тем, что вещества для такой процедуры не обязательно синтезировать – их структуры можно моделировать!!! В результате можно подобрать структуру определённого размера и геометрии, которая хорошо подходит под мишень.</p>
<p>11. Специалист по основам дизайна получил задание установить соединение лидер при условии, что ничего не известно - ни структура биомишени, ни структура лиганда.</p> <p>то для поиска соединения-лидера используют метод комбинаторной химии (синтез библиотек соединений и их тестирование). Нужная активность, обычно используют метод QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship)..</p>	<p>ОПК-1.</p>	<p>Метод QSAR работает следующим образом. Сначала группу соединений с известной структурой и известными значениями физиологической активности (полученными из эксперимента) делят на две части: обучающий и тестовый набор. В этих наборах цифры, характеризующие активность, уже соотнесены с конкретной структурой. Далее выбираются дескрипторы — хорошие компьютерные программы способны перебирать многие сотни дескрипторов. На следующем этапе строят математическую зависимость активности от выбранных дескрипторов для соединений из тренировочного набора и получают так называемое QSAR-уравнение.</p>
<p>13. Специалист по медицинской химии получил задание устранить соответствует ли α-токоферол правилу Липински.</p>	<p>ОПК-1.</p>	<p>Для α-токоферола были рассчитаны следующие характеристики:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) $\text{LogP} = 10,51$ (logP должен быть меньше 5); 2) Число акцепторов водородных связей = 2; 3) Число доноров водородных связей = 1 (в молекуле должно быть: не более пяти доноров водородной связи, не более 10 акцепторов водородной связи); 4) Площадь полярной группы =

		29.46 Å (молекулярная масса должна быть не менее 350 Да и не более 500 Да). Вывод: не соответствует
--	--	--

Критерии оценивания практических задач

Форма проведения текущего контроля	Критерии оценивания
Решения практической задачи	«5» (отлично) – выставляется за полное, безошибочное выполнение задания
	«4» (хорошо) – в целом задание выполнено, имеются отдельные неточности или недостаточно полные ответы, не содержащие ошибок.
	«3» (удовлетворительно) – допущены отдельные ошибки при выполнении задания.
	«2» (неудовлетворительно) – отсутствуют ответы на большинство вопросов задачи, задание не выполнено или выполнено не верно.

Шкала оценки для проведения зачета с оценкой по дисциплине

Оценка за ответ	Критерии
Отлично	<ul style="list-style-type: none"> – полно раскрыто содержание материала; – материал изложен грамотно, в определенной логической последовательности; – продемонстрировано системное и глубокое знание программного материала; – точно используется терминология; – показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами, применять их в новой ситуации; – продемонстрировано усвоение ранее изученных сопутствующих вопросов, сформированность и устойчивость компетенций, умений и навыков; – ответ прозвучал самостоятельно, без наводящих вопросов; – продемонстрирована способность творчески применять знание теории к решению профессиональных задач; – продемонстрировано знание современной учебной и научной литературы; – допущены одна – две неточности при освещении второстепенных вопросов, которые исправляются по замечанию.
Хорошо	<ul style="list-style-type: none"> – вопросы излагаются систематизировано и последовательно; – продемонстрировано умение анализировать материал, однако не все выводы носят аргументированный и доказательный характер; – продемонстрировано усвоение основной литературы. – ответ удовлетворяет в основном требованиям на оценку «5», но при этом имеет один из недостатков: в изложении допущены небольшие пробелы, не исказившие содержание ответа; допущены один – два недочета при освещении основного содержания ответа, исправленные по замечанию преподавателя; допущены ошибка или более двух недочетов при освещении второстепенных вопросов, которые легко исправляются по замечанию преподавателя.
Удовлетворительно	<ul style="list-style-type: none"> – неполно или непоследовательно раскрыто содержание материала, но показано общее понимание вопроса и продемонстрированы умения, достаточные для дальнейшего усвоения материала; – усвоены основные категории по рассматриваемому и дополнительным вопросам;

	<ul style="list-style-type: none"> – имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, исправленные после нескольких наводящих вопросов; – при неполном знании теоретического материала выявлена недостаточная сформированность компетенций, умений и навыков, студент не может применить теорию в новой ситуации; – продемонстрировано усвоение основной литературы.
Неудовлетворительно	<ul style="list-style-type: none"> – не раскрыто основное содержание учебного материала; – обнаружено незнание или непонимание большей или наиболее важной части учебного материала; – допущены ошибки в определении понятий, при использовании терминологии, которые не исправлены после нескольких наводящих вопросов - не сформированы компетенции, умения и навыки, - отказ от ответа или отсутствие ответа

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
«Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ»
Специальность 33.05.01 Фармация (уровень специалитета)

Цель дисциплины: 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».

Задачи дисциплины:

- 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.

МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина «Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» основной профессиональной образовательной программы. Дисциплина «Основы дизайна и химия лекарств и их наноформ» изучается в VII семестре очной формы обучения. (Б1.Б13 базовая часть).

1. Содержание дисциплины:

Раздел 1. Введение в основы дизайна лекарств. Значение фармакокинетики для дизайна ЛВ. Качественная зависимость строение – биоактивность. Основные компьютерные методы, используемые в драг-дизайне.

Раздел 2. Флавоноиды, как антиоксиданты и источники новых биологически активных соединений.

2. Общая трудоемкость 3 ЗЕ (180 часов).

3. Результаты освоения дисциплины:

В результате изучения дисциплины обучающийся должен:

В результате изучения дисциплины обучающийся должен:

Знать: 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 медицинской продукции, основы управления проектом.

Уметь: - проводить отбор и анализ научных публикаций, информации специализированных баз данных и подготовку соответствующих аналитических заключений по органическому синтезу и скринингу целевых продуктов; оценивать и осуществлять анализ

научных данных для целей химического и фармакологического скрининга; осуществлять необходимые расчеты, вычисления и построение моделей с использованием специализированных аналитических инструментов и методов медицинской химии; проводить подготовку обоснований, технических заданий для поставщиков услуг по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу; контролировать ход и результаты реализации проекта по химическому синтезу и/или фармакологическому скринингу.

Владеть: отбором и систематизацией информации подготовки обзоров и обновления научной литературы, мониторинга новейших химических и фармацевтических разработок ведущих стран мира; использования технических средств, для решения практических задач с использованием современного химического оборудования и компьютеризованных приборов; молекулярного моделирования структур биологически активных соединений с заданными фармакологическими свойствами и поиск путем конструирования соединений; критического осмысления лидеров с использованием логико-структурного подхода, а также программ различной направленности; достоверно проводить корреляционный анализ и верно интерпретировать результаты синтетических и фармакологических экспериментальных исследований статистической обработки результатов проведенных исследований.

4. Перечень компетенций, вклад в формирование которых осуществляет дисциплина

ОПК- 8. Способен использовать основные физико-химические, математические и естественнонаучные понятия и методы при решении профессиональных задач (контролируемы индикаторы достижения ОПК 8.1-Применяет алгоритмы основных физико-химических, математических и иных естественнонаучных методов исследований при решении профессиональных задач; ОПК 8.2- Интерпретирует данные основных физико-химических и естественно-научных методов исследования, обосновывает выбор метода статистического анализа при решении профессиональных задач).

Форма контроля: Зачет