

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тольяттинский государственный университет»

**Б1.В.01.02**  
(индекс дисциплины)

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

Медицинская химия 2

(наименование дисциплины)

по направлению подготовки  
04.03.01 Химия

направленность (профиль)  
Медицинская и фармацевтическая химия

Форма обучения: очная

Год набора: 2019

Общая трудоемкость: 8 ЗЕ

**Распределение часов дисциплины по семестрам**

Семестр	7	Итого
Форма контроля	экзамен	
Вид занятий		
Лекции	68	68
Лабораторные	102	102
Практические	68	68
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР		
Промежуточная аттестация	0,35	0,35
Контактная работа	238,35	238,35
Самостоятельная работа	14	14
Контроль	35,65	35,65
<b>Итого</b>	<b>288</b>	<b>288</b>

Рабочую программу составил(и):

доцент, Бунев А.С.  
профессор, к.б.н., Хоченков Д.А.  
доцент, к.м.н., Петров А.В.

---

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рецензирование рабочей программы дисциплины:



Отсутствует



Рецензент

---

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана  
направления подготовки

04.03.01 Химия

---

Срок действия рабочей программы дисциплины до «\_31\_» \_августа\_ 2023 г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании центра медицинской химии

---

(протокол заседания № 3 от «19» сентября 2019 г.).

## 1. Цель освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины «Медицинская химия» сформировать у студентов фундаментальные представления о молекулярном дизайне физиологически-активных соединений с заданными фармакокинетическим и фармакодинамическим профилями.

## 2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Органическая химия и основы органического синтеза», «Аналитическая химия», «Биохимия клетки», «Химия гетероциклических соединений 1», «Медицинская химия 1».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Основы молекулярного дизайна биологически активных соединений», «Основы молекулярного моделирования биологически активных соединений», «Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы», «Медицинская химия 3».

## 3. Планируемые результаты обучения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
ПК - 1 Способен планировать и осуществлять направленный органический синтез биологически активных соединений на основе современных подходов структурно-ориентированного и лиганд-ориентированного молекулярного дизайна под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-1.1 Выбирает и использует основные подходы в структурно-ориентированном и лиганд-ориентированном молекулярном дизайне, достижения в этой области и возможные пути развития направленного синтеза для решения поставленных задач НИР	Знать: основные подходы молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов.
		Уметь: выбрать оптимальные пути развития синтеза для решения поставленных задач
		Владеть: основными методологическими подходами, базирующимися на понимании основных количественных соотношений, структурно-свойство, а также о строении биологической мишени, для конструирования лекарственных препаратов.
	ПК-1.2 Планирует и проводит отдельные стадии исследования по синтезу заданной структуры биологически активного соединения в рамках структурно-ориентированного и лиганд-ориентированного подхода, при наличии	Знать: классификацию лекарственных препаратов и их основные сферы применения. Уметь: используя знания в области органического синтеза планировать и осуществлять сложные многостадийные синтетические схемы получения фармакологически активных соединений

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
	общего плана НИР	Владеть: структурно-ориентированным и лиганд-ориентированным подходом для конструирования биологически активного соединения заданной структуры
ПК-3 Способен планировать, осуществлять (и интерпретировать результаты) ряд молекулярно-биологических и биохимических исследований биологической активности органических соединений <i>in vitro</i> на основе современных представлений в области биохимии клетки под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-3.1 Планирует отдельные стадии молекулярно-биологического и биохимического исследования биологической активности соединений <i>in vitro</i> при наличии общего плана НИР.	Знать: основные подходы <i>in vitro</i> исследовании, применяемых при разработке биологически активных соединений.
		Уметь: планировать отдельные стадии молекулярно-биологического и биохимического исследования биологической активности соединений <i>in vitro</i>
		Владеть: рядом молекулярно-биологических и биохимических исследований биологической активности органических соединений <i>in vitro</i>
	ПК-3.2 Выбирает и реализует методику эксперимента по оценке заданного вида биологической активности органических соединений <i>in vitro</i> для решения поставленных задач НИР, анализирует и оформляет результаты.	Знать: основные методы молекулярно-биологического и биохимического исследования биологической активности органических соединений <i>in vitro</i>
		Уметь: проводить и интерпретировать результаты эксперимента по оценке заданного вида биологической активности органических соединений <i>in vitro</i>
		Владеть: основными инструментальными методами молекулярно-биологического и биохимического исследования биологической активности органических соединений <i>in vitro</i>
ПК-4 Способен осуществлять конструирование биологически активных соединений с заданным фармакологическим и токсикологическим профилем на основе современных	ПК-4.1 Планирует отдельные стадии исследования по молекулярному дизайну с применением современного программного обеспечения, при наличии общего плана НИР	Знать: основы молекулярного высокопроизводительного докинга, QSAR-анализ, ADMET предсказание
		Уметь: планировать эксперименты по молекулярному моделированию биологически активных соединений.
		Владеть: приемами конструирования биологически

<b>Формируемые и контролируемые компетенции</b> (код и наименование)	<b>Индикаторы достижения компетенций</b> (код и наименование)	<b>Планируемые результаты обучения</b>
представлений медицинской химии под руководством специалиста более высокой квалификации		активных соединений с заданным фармакологическим и токсикологическим профилем
	ПК-4.2 Реализует эксперименты по молекулярному моделированию с применением современных методов молекулярного докинга и QSAR-анализа для решения поставленных задач НИР.	Знать: основные методологические подходы используемые при молекулярном дизайне с применением специализированного программного обеспечения
		Уметь: проводить эксперименты по молекулярному моделированию биологически активных соединений.
		Владеть: навыками работы на основных открытых программных продуктах, предназначены для молекулярного моделирования.

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
Модуль 1.	Лек 1	Лиганд-ориентированный дизайн. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 1	Лиганд-ориентированный дизайн. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лаб 1	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 2	Лиганд-ориентированный дизайн. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 2	Лиганд-ориентированный дизайн. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лаб 2	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 3	Лиганд-ориентированный дизайн. Часть 3	7	2	-	-	-
	Пр 3	Лиганд-ориентированный дизайн. Часть 3	7	2	-	-	-
	Лаб 3	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 4	De novo молекулярный дизайн.	7	2	-	-	-
	Пр 4	De novo молекулярный дизайн.	7	2	-	-	-

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лаб 4	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	Контрольная работа
	Лек 5	Структурно-ориентированный de novo дизайн	7	2	-	-	-
	Пр 5	Структурно-ориентированный de novo дизайн	7	2	-	-	-
	Лаб 5	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 6	De novo дизайн от фрагмента до молекулярного докинга.	7	2	-	-	-
	Пр 6	De novo дизайн от фрагмента до молекулярного докинга.	7	2	-	-	-
	Лаб 6	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 7	Идентификация хита и лидера на основе фрагмента в de novo дизайне	7	2	-	-	-
	Пр 7	Идентификация хита и лидера на основе фрагмента в de novo дизайне	7	2	-	-	-
	Лаб 7	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лек 8	Фармакофор-ориентированный de novo дизайн. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 8	Фармакофор-ориентированный de novo дизайн. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лаб 8	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 9	Фармакофор-ориентированный de novo дизайн. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 9	Фармакофор-ориентированный de novo дизайн. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лаб 9	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 10	3D-QSAR в приложении к de novo дизайну. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 10	3D-QSAR в приложении к de novo дизайну. Часть 1	7	2	-	-	Контрольная работа
	Лаб 10	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 11	3D-QSAR в приложении к de novo дизайну. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 11	3D-QSAR в приложении к de novo дизайну. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лаб 11	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-



Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лек 12	Роль ADME/PK в открытии, оценки безопасности и клинической разработке лекарств. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 12	Роль ADME/PK в открытии, оценки безопасности и клинической разработке лекарств. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лаб 12	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 13	Роль ADME/PK в открытии, оценки безопасности и клинической разработке лекарств. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 13	Роль ADME/PK в открытии, оценки безопасности и клинической разработке лекарств. Часть 2	7	2	-	-	Контрольная работа
	Лаб 13	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 14	Роль ADME/PK в открытии, оценки безопасности и клинической разработке лекарств. Часть 3	7	2	-	-	-
	Пр 14	Роль ADME/PK в открытии, оценки безопасности и клинической разработке лекарств. Часть 3	7	2	-	-	-
	Лаб 14	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лек 15	Роль ADME/ПК в открытии, оценки безопасности и клинической разработке лекарств. Часть 4	7	2	-	-	-
	Пр 15	Роль ADME/ПК в открытии, оценки безопасности и клинической разработке лекарств. Часть 4	7	2	-	-	-
	Лаб 15	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 16	Медицинская химия в действии. Осимертиниб. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 16	Медицинская химия в действии. Осимертиниб. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лаб 16	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 17	Медицинская химия в действии. Осимертиниб. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 17	Медицинская химия в действии. Осимертиниб. Часть 2	7	2	-	-	Контрольная работа
	Лаб 17	Дизайн ингибиторов PI3K	7	6	-	-	-
	Лек 18	Медицинская химия в действии. Траметиниб. Часть 1	7	2	-	-	-

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Пр 18	Медицинская химия в действии. Траметиниб. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лек 19	Медицинская химия в действии. Траметиниб. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 19	Медицинская химия в действии. Траметиниб. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лек 20	Медицинская химия в действии. Создание гипоксию-активирующего пролекарства SN30000. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 20	Медицинская химия в действии. Создание гипоксию-активирующего пролекарства SN30000. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лек 21	Медицинская химия в действии. Создание гипоксию-активирующего пролекарства SN30000. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 21	Медицинская химия в действии. Создание гипоксию-активирующего пролекарства SN30000. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лек 22	Медицинская химия в действии. Открытие первых в своем классе ингибиторов Nedd8-активирующего фермента (NAE) и убиквитин-активирующий фермент (UAE). Часть 1.	7	2	-	-	-

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Пр 22	Медицинская химия в действии. Открытие первых в своем классе ингибиторов Nedd8-активирующего фермента (NAE) и убиквитин-активирующий фермент (UAE). Часть 1.	7	2	-	-	-
	Лек 23	Медицинская химия в действии. Открытие первых в своем классе ингибиторов Nedd8-активирующего фермента (NAE) и убиквитин-активирующий фермент (UAE). Часть 2.	7	2	-	-	-
	Пр 23	Медицинская химия в действии. Открытие первых в своем классе ингибиторов Nedd8-активирующего фермента (NAE) и убиквитин-активирующий фермент (UAE). Часть 2.	7	2	-	-	Контрольная работа
	Лек 24	Медицинская химия в действии. Открытие ингибиторов p97. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 24	Медицинская химия в действии. Открытие ингибиторов p97. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лек 25	Медицинская химия в действии. Открытие ингибиторов p97. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 25	Медицинская химия в действии. Открытие ингибиторов p97. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лек 26	Медицинская химия в действии. Открытие AMG337. Часть 1	7	2	-	-	-

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Пр 26	Медицинская химия в действии. Открытие AMG337. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лек 27	Медицинская химия в действии. Открытие AMG337. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 27	Медицинская химия в действии. Открытие AMG337. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лек 28	Медицинская химия в действии. Открытие первого селективного ингибитора АТМ-киназы. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 28	Медицинская химия в действии. Открытие первого селективного ингибитора АТМ-киназы. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лек 29	Медицинская химия в действии. Открытие первого селективного ингибитора АТМ-киназы. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 29	Медицинская химия в действии. Открытие первого селективного ингибитора АТМ-киназы. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лек 30	Медицинская химия в действии. Создание тепотиниба. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 30	Медицинская химия в действии. Создание тепотиниба. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лек 31	Медицинская химия в действии. Создание тепотиниба. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 31	Медицинская химия в действии. Создание тепотиниба. Часть 2	7	2	-	-	-
	Лек 32	Медицинская химия в действии. Создание тепотиниба. Часть 3	7	2	-	-	-

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Пр 32	Медицинская химия в действии. Создание тепотиниба. Часть 3	7	2	-	-	-
	Лек 33	Медицинская химия в действии. Создание верубеcestата. Часть 1	7	2	-	-	-
	Пр 33	Медицинская химия в действии. Создание верубеcestата. Часть 1	7	2	-	-	-
	Лек 34	Медицинская химия в действии. Создание верубеcestата. Часть 2	7	2	-	-	-
	Пр 34	Медицинская химия в действии. Создание верубеcestата. Часть 2	7	2	-	-	-
	Ср	Изучение лекционного материала и оригинальной литературы. Подготовка к экзамену	7	14	-	-	-
	Контроль	Подготовка к экзамену	7	35,65	-	-	Вопросы к экзамену № 1-46
	ПА	Промежуточная аттестация (экзамен)	7	0,35	-	-	Вопросы к экзамену № 1-46
<b>Итого:</b>				<b>288</b>			

## **5. Образовательные технологии**

При реализации дисциплины используется технология традиционного обучения – организация учебного процесса в вузе, основанная на лекционно-семинарско-зачетной формах обучения. К формам обучения относятся лекции, практические и лабораторные занятия, а также самостоятельная работа. На лекциях используются наглядные и словесные методы обучения, на практических и лабораторных занятиях – наглядные, словесные и практические методы. Оценивание знаний студентов производится по балльно-рейтинговой системе.

## **6. Методические указания по освоению дисциплины**

Самостоятельная работа – это совокупность всей самостоятельной деятельности студентов, как в учебной аудитории, так и вне ее, в контакте с преподавателем и в его отсутствии.

Самостоятельная работа реализуется:

- непосредственно в процессе аудиторных занятий.
- в контакте с преподавателем вне рамок расписания – консультации по учебным вопросам и при выполнении творческих и индивидуальных заданий.
- в виде внеаудиторной самостоятельной работы.

Самостоятельная работа студентов предполагает более углубленное освоение материала лабораторных занятий, отдельных вопросов материала курса, выносимых на самостоятельное изучение, а также творческих заданий, связанных с образовательной и научной исследовательской деятельностью.

Целевые направления самостоятельной работы студентов:

1. Для овладения и углубления знаний:
  - конспектирование текста;
  - составление тезауруса;
  - ознакомление с нормативными документами;
  - создание презентации.
2. Для закрепления знаний:
  - работа с конспектом лекции;
  - повторная работа с учебным материалом;
  - составление плана ответа;
  - составление различных таблиц.
3. Для систематизации учебного материала:
  - подготовка ответов на контрольные вопросы;
  - подготовка сообщения, доклада, реферата;
  - тестирование;
  - составление инструкции и памятки.
4. Для формирования практических и профессиональных умений.
  - решение задач и упражнений по образцу;
  - решение ситуативных и профессиональных задач;

Средства обучения:

- дидактические средства, которые могут быть источником самостоятельного приобретения знаний (первоисточники, документы, сборники задач и упражнений, журналы и газеты, учебные фильмы, карты, таблицы);
- технические средства, при помощи которых предъявляется учебная информация (компьютеры, аудио - видеотехника);

- средства, которые используют для руководства самостоятельной деятельностью студентов (инструктивно - методические указания, карточки с дифференцированными заданиями для организации индивидуальной и групповой работы, карточки с алгоритмами выполнения заданий).

## 7. Оценочные средства

### 7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
7	ПК-1; ПК-3; ПК-4	Вопросы к экзамену 1-46 Контрольная работа

### 7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

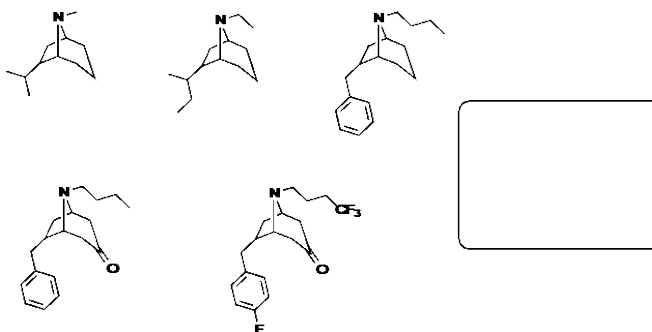
#### 7.2.1. Контрольная работа

(наименование оценочного средства)

#### Типовые примеры заданий

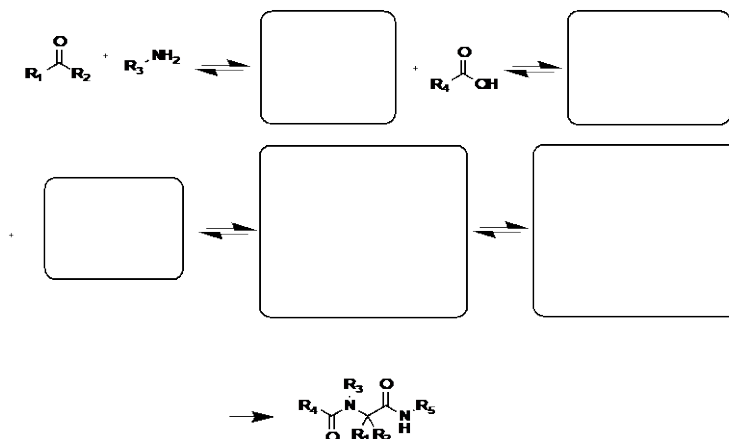
1. Вы проводите трехкомпонентный синтез между реагентами А, В и С. Реагентов типа А - 5, типа В - 6, типа С - 9. Сколько соединений будет содержать комбинаторная библиотека?

2. Выделите из серии соединений базовый скафолд.

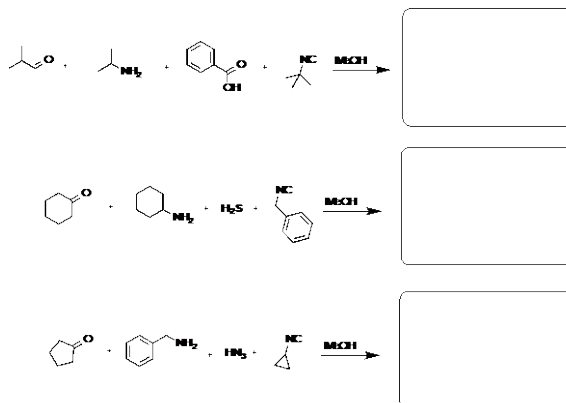


3. Восстановите недостающие элементы механизма реакции Уги.

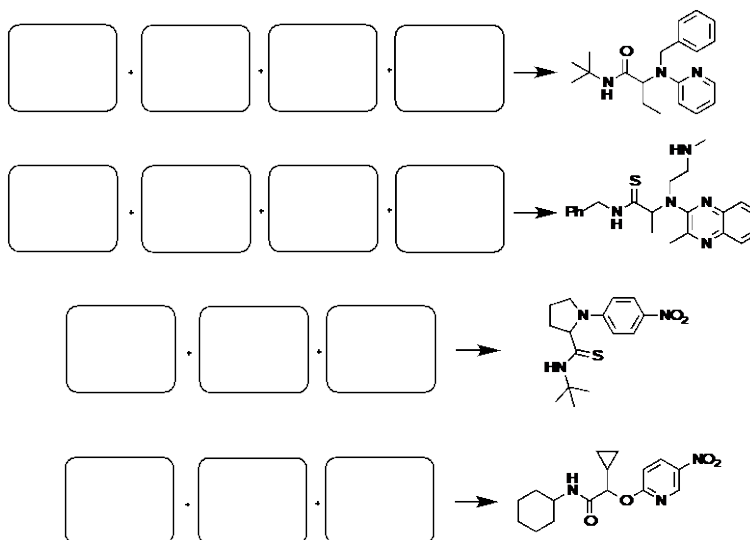




4. Изобразите структурные формулы продуктов нижеприведенных реакций:

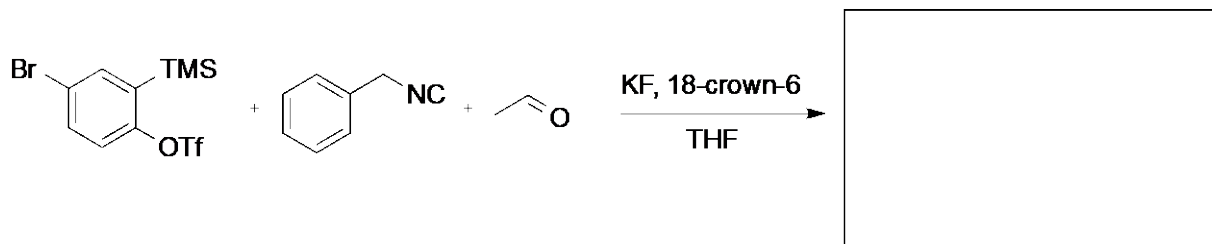


5. Укажите реакция между какими реагентами привела к получению нижеприведенных продуктов.

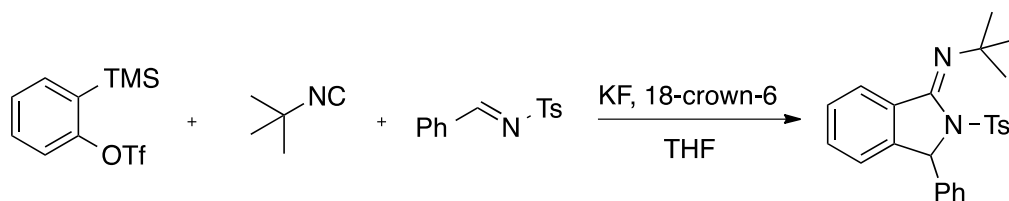


### Контрольная работа

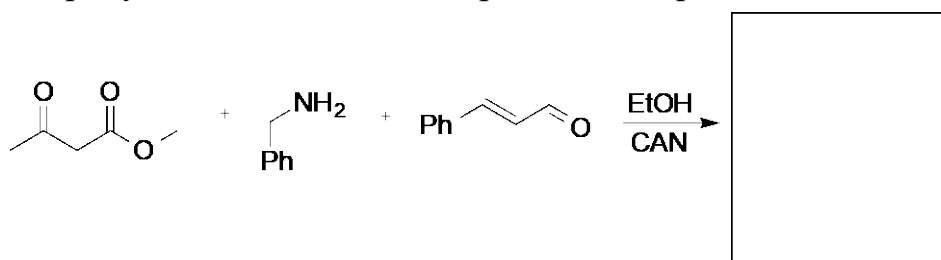
1. Приведите несколько (2-3 способа) препаративных методик генерирования аринов.
2. Изобразите продукт нижеприведенной реакции.



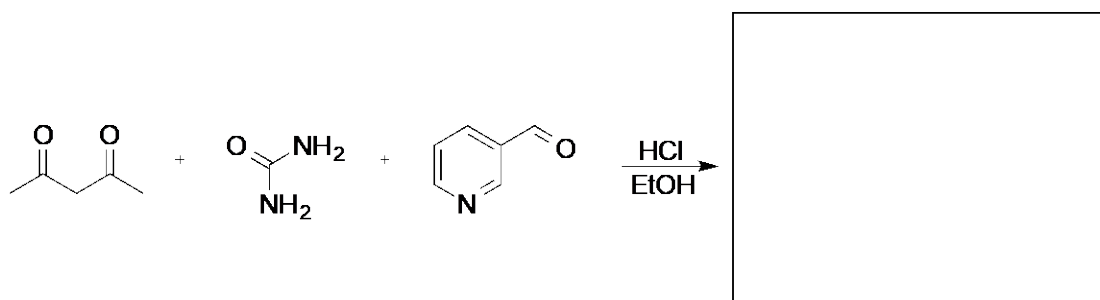
3. Изобразите механизм нижеприведенной реакции.



4. Изобразите продукт и механизм нижеприведенной реакции.



5. Изобразите продукт и механизм нижеприведенной реакции.



### 7.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

#### 7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 7

№ п/п	Вопросы
1.	Открытие лекарства: определение лидера. Выбор болезни.
2.	Открытие лекарства: определение лидера. Выбор биологической мишени.
3.	Открытие лекарства: определение лидера. Выбор бионализа.
4.	Открытие лекарства: определение лидера. Поиск соединения лидера.
5.	Открытие лекарства: определение лидера. Выделение и очистка.
6.	Дизайн лекарств. Оптимизация взаимодействий с биомишенью. Отношение структура-активность.
7.	Дизайн лекарств. Оптимизация взаимодействий с биомишенью. Идентификация фармакофора.
8.	Дизайн лекарств. Оптимизация взаимодействий с биомишенью. Оптимизация лидера: стратегии дизайна лекарств.
9.	Дизайн лекарств. Оптимизация доступности для биомишени. Оптимизация гидрофильных/гидрофобных свойств.
10.	Дизайн лекарств. Оптимизация доступности для биомишени. Повышение устойчивости к химической и ферментативной деградации.
11.	Дизайн лекарств. Оптимизация доступности для биомишени. Повышение
12.	устойчивости к метаболизму.
13.	Дизайн лекарств. Оптимизация доступности для биомишени. Ориентация на биомишень.
14.	Дизайн лекарств. Оптимизация доступности для биомишени. Понижение токсичности.
15.	Дизайн лекарств. Оптимизация доступности для биомишени. Пролекарства.
16.	Дизайн лекарств. Оптимизация доступности для биомишени. Лекарственные альянсы.
17.	Эндогенные соединения как лекарственные соединения
18.	Пептиды и пептидомиметики в дизайне лекарственных средств.
19.	Олигонуклеотиды как лекарства.
20.	Вывод лекарства на рынок. Доклинические и клинические испытания.
21.	Вывод лекарства на рынок. Патентование и регулирование.
22.	Вывод лекарства на рынок. Химико-технологическая разработка производства лекарства.
23.	Комбинаторной и параллельный синтез в проектах медицинской химии.
24.	Техника твердофазного синтеза.
25.	Планирование и проектирование сложных комбинаторных библиотек.
26.	Тестирование биологической активности.
27.	Параллельный синтез.
28.	Комбинаторный синтез.
29.	Молекулярный докинг.
30.	Биологическая активность и конформационный анализ.
31.	De novo дизайн лекарств.
32.	История и разработка метода QSAR

33.	Биологические данные. Аддитивность вкладов группы
34.	Параметры и характеризующие их индексы
35.	Количественные модели. Дополненный термодинамический подход. Анализ Ганча
36.	Количественные модели. Аддитивная модель. Свободный анализ Вильсона
37.	Количественные модели. Нелинейные зависимости
38.	Статистические методы. Значимость и достоверность QSAR уравнений регрессии
39.	Конструкция серии испытаний в QSAR
40.	Применение Анализа Ганча. Ингибиторы ферментов. Фармакокинетические данные.
41.	Применение свободного анализа Вильсона и прочих моделей.
42.	3D-QSAR. Стереохимия и действие лекарственного вещества
43.	3D-QSAR. Модель активного сайта связывания
44.	3D-QSAR. Метод сравнительного анализа молекулярных полей
45.	3D-QSAR. Метод сравнительного анализа индексов молекулярного подобия
46.	3D-QSAR основанный на рецепторе

### 7.3.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
7	устный экзамен	«отлично»	Полные и четкие ответы на вопросы экзаменационного билета; Правильные ответы на дополнительные вопросы по лекционному курсу
		«хорошо»	Достаточно полные ответы на вопросы теоретического характера экзаменационного билета, однако при детализации некоторых ответов испытывает затруднения; Нечетко отвечает на дополнительные вопросы, проявляя при этом неглубокие знания
		«удовлетворительно»	Показывает неполные или неглубокие знания при ответе на теоретические вопросы, При ответе на дополнительные вопросы испытывает серьезные затруднения
		«неудовлетворительно»	Не отвечает на вопросы теоретического характера или отвечает неправильно, неполно;

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Аксенова Э.Н., Андрианова О.П., Арзамасцев А.П., Власов А.М., Дементьев С.П., Дорофеев В.Л., Карташев В.С., Касумова К.В., Коваленко Л.И., Кузина В.Н., Печенников В.М., Прокофьева В.И., Раменская Г.В., Родионова Г.М., Рыженкова А.П., Садчикова Н.П., Трухачева Л.А., Филатова И.С., Чернова С.В., Чугаев Д.В., Чумакова З.В., Щепочкина О.Ю. ред. Раменской Г.В.	Фармацевтическая химия : учебник / Э. Н. Аксенова, О. П. Андрианова, А. П. Арзамасцев [и др.] ; под редакцией Г. В. Раменской. — 3-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2019. — 468 с. — ISBN 978-5-00101-647-2. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <a href="http://www.iprbookshop.ru/88957.html">http://www.iprbookshop.ru/88957.html</a>	Учебник	2019	ЭБС «IPRbooks»

2	Мокрушин В.С., Вавилов Г.А.	Мокрушин, В. С. Основы химии и технологии биоорганических и синтетических лекарственных веществ : учебное пособие / В. С. Мокрушин, Г. А. Вавилов. — Санкт-Петербург : Проспект Науки, 2017. — 496 с. — ISBN 978-5-903090-23-5. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <a href="http://www.iprbookshop.ru/79977.html">http://www.iprbookshop.ru/79977.html</a>	Учебное пособие	2017	ЭБС «IPRbooks»
---	-----------------------------	---	-----------------	------	----------------

## 8.2. Дополнительная литература

<b>№ п/п</b>	<b>Авторы, составители</b>	<b>Заглавие (заголовок)</b>	<b>Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)</b>	<b>Год издания</b>	<b>Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС</b>
1	Степанов В.М. ред. Спирин А.С.	Степанов, В. М. Молекулярная биология. Структура и функция белков : учебник / В. М. Степанов ; под редакцией А. С. Спирин. — Москва : Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2005. — 336 с. — ISBN 5-211-04971-3. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <a href="http://www.iprbookshop.ru/13144.html">http://www.iprbookshop.ru/13144.html</a>	Учебник	2005	ЭБС «IPRbooks»

### 8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

- Бутлеровские сообщения [Электронный ресурс] : многопредмет. науч. журн. / ООО «Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие»». – Электрон. журнал. – Казань : ООО «Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие»», 1999- . Режим доступа к журн.: <http://butlerov.com/stat/reports/view.asp?lang=ru>
- Химия в интересах устойчивого развития [Электронный ресурс] : междунар. науч. журн. / Сибирское отделение РАН. – Электрон. журнал. – Новосибирск : Издательство СО РАН, 1999- . Режим доступа к журн. <http://www.sibran.ru/journals/Hviur/>
- WebofScience [Электронный ресурс]: мультидисциплинарная реферативная база данных. – Philadelphia: ClarivateAnalytics, 2016 – Режим доступа: [apps.webofknowledge.com](https://apps.webofknowledge.com). – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Scopus [Электронный ресурс]: реферативная база данных. – Netherlands: Elsevier, 2004 – Режим доступа: [scopus.com](https://scopus.com). – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Elibrary [Электронный ресурс]: научная электронная библиотека. – Москва: НЭБ, 2000. – Режим доступа: [elibrary.ru](https://elibrary.ru). – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- SpringerLink [Электронный ресурс]: [база данных]. – Switzerland: SpringerNature, 1842. – Режим доступа: [link.springer.com](https://link.springer.com). – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ScienceDirect [Электронный ресурс]: коллекция электронных книг издательства Elsevier. – Netherlands: Elsevier, 2018. – Режим доступа: [sciencedirect.com](https://sciencedirect.com). – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ЭБС " IPRbooks" (права принадлежат ООО Компания "Ай Пи Ар Медиа"), [договор № 468 от 04.06.2020 г.](#) с 01.08.2020 г. по 01.08.2021 г. (по адресу <http://www.iprbookshop.ru>)- содержит учебники и учебные пособия, монографии, производственно-практические, справочные издания, а также деловую литературу для практикующих специалистов. В ЭБС включены издания за последние 5 лет по гуманитарным, социальным и экономическим наукам, по остальным отраслям знания - за последние 10 лет.

### 8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	Windows	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия - бессрочно
2	Office Standart	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия - бессрочно; Договор № 727 от 20.07.2016г., срок действия - бессрочно

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

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А-215	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
2	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А- 306	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
3	НИЛ "Функциональные гетероциклические соединения" Лаборатория органической химии. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. А-203	Доска меловая, стол письменный, столы лабораторные островные, полка для лабораторных принадлежностей, рефрактометр ИРФ 454 Б2М, столы лабораторные, тумбы для посуды и реактивов., мойка, вытяжные шкафы, столы письменные, шкаф для реактивов, шкаф сушильный Экрос 4610, колбонагреватель 4120, перемешивающее устройство 4610М, электроплитки, весы лабораторные ВК-300, Поляриметр СМ-3, табуреты лабораторные, химическая посуда
4	Лаборатория "Биохимии клетки и метаболизма" Учебная аудитория для проведения лабораторных работ А-209	Столы лабораторные, стол лабораторный с полкой, стол письменный, стол виброустойчивый. Хроматограф ЛХМ-80, термостат VT8, генератор водорода, спектрофотометр КФК-3, шкаф вытяжной 1500ШВ, шкаф для химреактивов, стол с мойкой, весы электронные аналитические vibra, стол



№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
		виброустойчивый, баллон с азотом , баллон с гелием, табуреты лабораторные, химическая посуда.
4	Помещение для самостоятельной работы студентов. Г-401	Стол� ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет .