

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова**

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А. Маракаев  
«21» мая 2024 г.

**Рабочая программа**  
**«Современные представления о структуре лекарственных веществ»**

Направление подготовки  
04.04.01 Химия

Направленность (профиль)  
«Физико-органическая и фармацевтическая химия»

Форма обучения  
очная

Программа одобрена  
на заседании института  
протокол № 9 от «18» апреля 2024 года

Программа одобрена  
НМК факультета биологии и экологии  
протокол № 6 от «29» апреля 2024 года

Ярославль

### 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов фундаментальных знаний по взаимосвязи структуры химических веществ и их биологической активностью, умений и навыков экспериментальной работы по определению параметров структуры веществ и моделированию их взаимодействия с сайтами для связывания.

Курс вырабатывает у студентов современные представления о взаимосвязи строения и биологической активности химических веществ, закономерностях протекания химических и биохимических процессов, научных теориях, химических превращениях веществ в живых организмах.

### 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Современные представления о структуре и действии лекарственных веществ» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока 1 (Б1.В.06).

Для освоения данной дисциплины студенты должны владеть математическим аппаратом, уметь находить корреляционные зависимости, применять приемы сравнения, анализа и синтеза, объяснения причинно-следственных связей, обобщения, иметь представление об основных классах химических соединений и их свойствах. Знания и навыки, полученные при изучении данной дисциплины, используются обучаемыми при освоении других профессиональных дисциплин и при выполнении выпускной работы магистра.

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

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ООП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
<b>Профессиональные компетенции</b>		
<b>ПК-2-н</b> Способен проводить патентно-информационные исследования, способен к поиску и анализу научной информации по физико-органической, фармацевтической химии, анализу и обобщению отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования.	<b>ПК-2-н.1</b> Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных.	<b>Знать:</b> – основные направления развития физико-органической, фармацевтической химии. <b>Уметь:</b> – оценивать актуальную для поиска информацию. <b>Владеть навыками:</b> – отбора актуальной информации; – проведения компьютерных экспериментов и интерпретации результатов.

	<p><b>ПК-2-н.2</b> Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике исследования в выбранной области химии (химической технологии).</p>	<p><b>Уметь:</b> – оценивать возможность реализации тех или иных видов биологической активности для целевых структур. <b>Владеть навыками:</b> – определения основных параметров для проявления целевой активности.</p>
<p><b>ПК-3-н</b> Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.</p>	<p><b>ПК-3-н.1</b> Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными по фармацевтической и медицинской химии.</p>	<p><b>Уметь:</b> – прогнозировать и анализировать свойства химических соединений в сопоставлении с их строением; <b>Владеть навыками:</b> – формирования целевых свойств.</p>
	<p><b>ПК-3-н.2</b> Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов в области фармацевтической и медицинской химии, химической технологии или смежных с химией науках.</p>	<p><b>Знать:</b> – взаимосвязь между строением химических соединений и их свойствами; – о воздействии химических веществ на биологические молекулярные системы, роль химических соединений в живых организмах, их метаболизм. <b>Уметь:</b> – прогнозировать и анализировать свойства химических соединений в сопоставлении с их строением; – классифицировать химические вещества и химические реакции; строить математические модели зависимости биологической активности соединений от параметров их структуры. <b>Владеть навыками:</b> – обращения с химическими веществами.</p>

<p><b>ПК-4-н</b> Способен использовать современные методы синтетической органической и элементоорганической химии для получения физиологически активных соединений.</p>	<p><b>ПК-4-н.1</b> Воспроизводит методики синтеза известных синтетических лекарственных препаратов и аналогов природных соединений.</p>	<p><b>Знать:</b> – общие методологии получения синтетических лекарственных препаратов; – о воздействии химических веществ на биологические молекулярные системы, роль химических соединений в живых организмах, их метаболизм. <b>Уметь:</b> – прогнозировать и анализировать свойства химических соединений в сопоставлении с их строением; – синтезировать целевые структуры. <b>Владеть навыками:</b> – обращения с химическими веществами и формирования их свойств.</p>
	<p><b>ПК-4-н.2</b> Разрабатывает и реализует новые схемы синтеза потенциальных физиологически активных веществ, содержащих гетероциклические, алициклические и другие группировки.</p>	<p><b>Знать:</b> – взаимосвязь между строением химических соединений и их свойствами; <b>Уметь:</b> – прогнозировать и анализировать свойства химических соединений в сопоставлении с их строением; – синтезировать целевые системы. <b>Владеть навыками:</b> – обращения с химическими веществами.</p>

#### 4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 акад.ч.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости  Форма промежуточной аттестации (по семестрам)  Формы ЭО и ДОТ (при наличии)
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Введение. Классификация лекарственных препаратов	3	1		3	0,5		14	Отчет по лабораторной работе
2	Биологические мишени действия ФАВ	3	2		3	0,5		14	Отчет по лабораторной работе, задания для самостоятельной работы
3	Механизмы действия химических веществ на биологические объекты	3	2		3	0,5		14	Отчет по лабораторной работе, задания для самостоятельной работы
4	Количественные соотношения строение – биологическая активность	3	2		4	0,5		14	Отчет по лабораторной работе, задания для самостоятельной работы
5	Молекулярный докинг. Моделирование взаимодействия «лекарство-мишень»	3	1		3			14	Отчет по лабораторной работе, задания для самостоятельной работы
							0,3	11,7	Зачет
	<b>ИТОГО</b>		<b>8</b>		<b>16</b>	<b>2</b>	<b>0,3</b>	<b>81,7</b>	

#### 4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

##### Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Место проведения занятий в форме практической подготовки
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Введение. Классификация лекарственных препаратов	3			3				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
2	Биологические мишени действия ФАВ	3			3				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
3	Механизмы действия химических веществ на биологические объекты	3			3				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
4	Количественные соотношения строение – биологическая активность.	3			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
5	Молекулярный докинг. Моделирование взаимодействия «лекарство-мишень»	3			3				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	<b>ИТОГО</b>				<b>16</b>				

#### Содержание разделов дисциплины

1. Введение. Классификация лекарственных препаратов.
  - 1.1. Введение. Классификация лекарственных препаратов.
  - 1.2. Основные принципы классификации биологически активных веществ. Понятия: *me-too drug*, *through - put screening*, *hit compound*.
  - 1.3. Структурные особенности мутагенов и других групп биологически активных веществ.
2. Биологические мишени действия ФАВ.
  - 2.1. Биологические молекулы в организме. Причины заболеваний.
  - 2.2. Биологические мишени действия ФАВ (липиды, белки, нуклеиновые кислоты) и принципы создания структур их лигандов.
  - 2.3. Структуры и мишени действия сульфамидов, фторхинолонов, нитрофуранов, пенициллинов; модификации с целью оптимизации их физиологической активности.
  - 2.4. Биологические мишени и принципы создания противораковых препаратов.
3. Механизмы действия химических веществ на биологические объекты
  - 3.1. Что происходит с веществом при попадании в организм. Механизмы действия.
  - 3.2. Понятие фармакофора. Необратимое ингибирование, структурные особенности ингибиторов (на примере ОВ нервно-паралитического действия и др.).

3.3. Агонисты и антагонисты.

3.4. Гормональные рецепторы, общий механизм гормональной регуляции.

4. Количественные соотношения строение – биологическая активность.

4.1. Понятие и определение величин  $EC_{50}$ ,  $IC_{50}$ ,  $ED_{50}$ ,  $LD_{50}$

4.2. Уравнение Скетчарда. Графическое определение сродства лиганда к рецептору

4.3. Тестирование *in vivo*: трансгенные животные; поведенческие модели (примеры).

4.4. Количественные соотношения строение – биологическая активность. Методология QSAR.

4.5. Предсказание биологической активности. Программа PASS.

5. Молекулярный докинг. Моделирование взаимодействия «лекарство-мишень»

5.1. Проблемы моделирования взаимодействия молекулы с биологической мишенью, понятие о молекулярном докинге. Взаимодействия фермент-ингибитор, рецептор-лиганд, интеркаляция в ДНК.

5.2. Дескрипторы, описывающие взаимодействие молекулы с биологической мишенью и их использование в QSAR. 2D и 3D фармакофоры. Достоинства и недостатки концепции фармакофоров.

5.3. Методы поиска фармакофоров. Использование фармакофоров для поиска новых классов биологически активных соединений.

5.4. QSAR с применением дескрипторов, описывающих атомы фармакофора. Методы поиска новых "лидеров": методы *de novo* и реализующие их компьютерные программы.

5.5. Молекулярный дизайн на основе известного фармакофора. Методы дизайна при известном строении биологической мишени (наращивание молекулы, соединение микрофрагментов).

5.6. Генерация структур лекарственного вещества из фрагментов для целей QSAR. Роль структурных ограничений в генерации.

## **5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

**Вводная лекция** – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с назначением и задачами курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки в целом. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

**Академическая лекция** (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов.

**Лабораторное занятие** – занятие, посвященное освоению конкретных умений и навыков и закреплению полученных на лекции знаний.

**Консультации** – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.,

В процессе обучения используются следующие технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии:

Электронный учебный курс «Современные представления о структуре лекарственных веществ» в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы обучающихся по темам дисциплины;
- представлены тексты лекций по отдельным темам дисциплины;
- представлен список учебной литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- посредством форума осуществляется синхронное и (или) асинхронное взаимодействие между обучающимися и преподавателем в рамках изучения дисциплины.

#### **6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

При осуществлении образовательного процесса используются:

- программы Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome.

#### **7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)**

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются:

- автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT»  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)

#### **8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины**

##### **а) основная литература**

1. Шабаров, Ю.С. Органическая химия : учебник для вузов / Ю.С. Шабаров. – 5-е изд., стереотип. – СПб.: Лань, 2011. – 847 с.  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1118979&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1118979&cat_cd=YARSU)
2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для вузов. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 495 с.  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1274957&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1274957&cat_cd=YARSU)
3. Фармакология: учебник и практикум для вузов / Е.В. Коноплёва; УМО высш. образования. – М.: Юрайт, 2017. – 446 с.  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=2070099&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=2070099&cat_cd=YARSU)  
<https://urait.ru/book/farmakologiya-413257>

##### **б) дополнительная литература**

1. Фармацевтическая химия: учеб. – Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. – 470 с. <https://e.lanbook.com/book/70696>
2. Шмид Р. Наглядная биотехнология и генетическая инженерия. / Р. Шмид; пер. с нем. А. А. Виноградовой, А. А. Синюшина; под. ред. Т. П. Мосоловой, А. А. Синюшина. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 324 с.  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1531440&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1531440&cat_cd=YARSU)

##### **в) ресурсы сети «Интернет»**

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ  
([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)).
2. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://www.edu.ru> (раздел Учебно-методическая библиотека) или по прямой ссылке <http://window.edu.ru/library>).
3. Американское химическое общество (<http://www.acs.org/>).



4. Королевское химическое общество (<http://www.rsc.org/>).

5. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.ru/>).

### **9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения лабораторных работ;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока, а в аудитории для лабораторных работ – списочному составу группы обучающихся.

Автор:

Профессор института  
фундаментальной и прикладной химии, д.х.н.

  
\_\_\_\_\_ В.Ю. Орлов

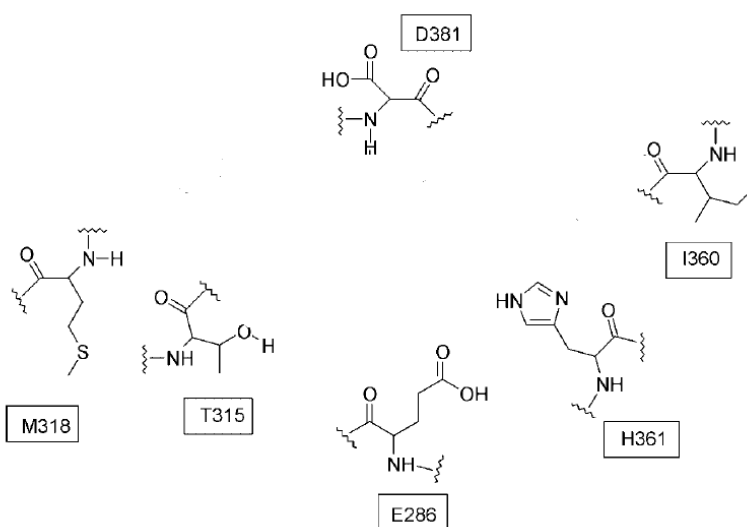
**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины  
«Современные представления о структуре лекарственных веществ»**

**Фонд оценочных средств  
для проведения текущего контроля успеваемости  
и промежуточной аттестации студентов  
по дисциплине**

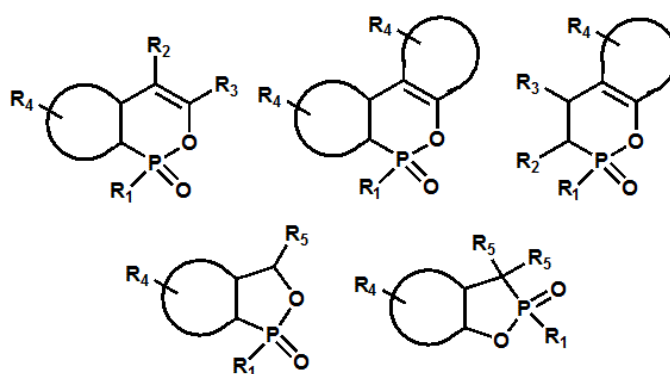
**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,  
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

**Задания для самостоятельной работы**

1. Сконструируйте низкомолекулярный лиганд для эффективного связывания со следующим сайтом:



2. Осуществите дизайн физиологически активных веществ (составить библиотеку соединений, отвечающих следующим требованиям)

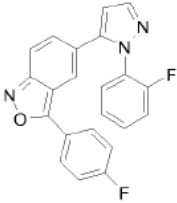
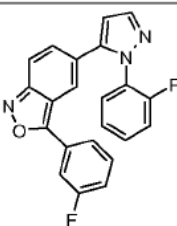
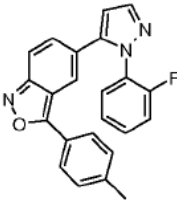
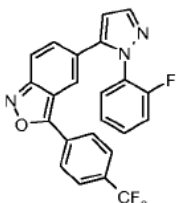
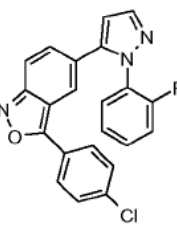
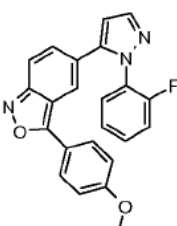


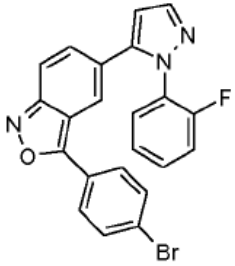
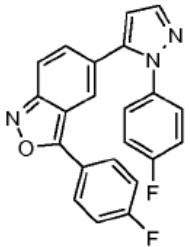
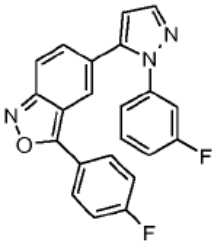
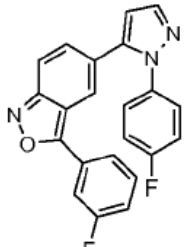
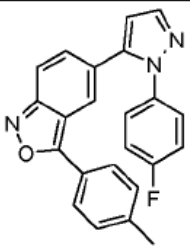
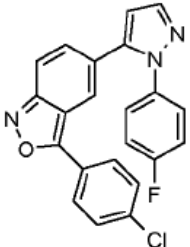
Где:

Заместители R	R1=alkyl, OH, O-Alkyl or H R2=Aryl, hetaryl, H or alkyl R3 = Aryl, hetaryl, H or alkyl R4 = Any substituent, including H R5 = Alkyl, Aryl Number of rings < or equal to 4
---------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Молекулярный вес	250 - 450
LogP	-1 to 4.5

3. Получить QSAR-уравнение для ряда 2,1-бензизоксазолов, для которых значения EC<sub>150</sub> представлены в таблице

Ex.	Structure	Name	EC <sub>150</sub> (uM)
1		3-(4-Fluoro-phenyl)-5-[2-(2-fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-benzo[c]isoxazole	0.12
2		3-(3-Fluoro-phenyl)-5-[2-(2-fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-benzo[c]isoxazole	0.29
3		5-[2-(2-Fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-3-p-tolyl-benzo[c]isoxazole	0.12
4		5-[2-(2-Fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-3-(4-trifluoromethyl-phenyl)-benzo[c]isoxazole	0.92
5		3-(4-Chloro-phenyl)-5-[2-(2-fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-benzo[c]isoxazole	0.033
6		5-[2-(2-Fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-3-(4-methoxy-phenyl)-benzo[c]isoxazole	0.073

7		3-(4-Bromo-phenyl)-5-[2-(2-fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]benzo[c]isoxazole	0.054
8		3-(4-Fluoro-phenyl)-5-[2-(4-fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-benzo[c]isoxazole	0.25
9		3-(4-Fluoro-phenyl)-5-[2-(3-fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-benzo[c]isoxazole	2.8
10		3-(3-Fluoro-phenyl)-5-[2-(4-fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-benzo[c]isoxazole	0.56
11		5-[2-(4-Fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-3-p-tolyl-benzo[c]isoxazole	0.23
12		3-(4-Chloro-phenyl)-5-[2-(4-fluoro-phenyl)-2H-pyrazol-3-yl]-benzo[c]isoxazole	0.26

4. Провести докинг органических молекул (набор не менее 5 единиц) для поиска новых соединений-«лидеров» в дизайне лекарственных препаратов.

## **Правила выставления оценки за самостоятельную работу**

Письменная самостоятельная работа состоит из небольшого количества средних по трудности вопросов или заданий, требующих поиска обоснованного ответа. Письменная самостоятельная работа студента должна занимать не более 20-30 минут учебного занятия с разбором правильных решений на следующем занятии. В зависимости от уровня работы, студент получает за неё отметку «зачтено» или «не зачтено».

*Зачтено:* в письменной форме подготовлен развернутый ответ, содержащий основные знания по теме; логично представлен обобщающий материал по заданной проблеме.

*Не зачтено:* дано неправильное или же, в значительной степени, неполное раскрытие поставленной задачи с серьезными пробелами и сбоями в логике изложения материала; либо же письменный ответ по заданию не получен вовсе.

## **Правила выставления оценки за лабораторную работу**

- *Отлично* выставляется, если обучающийся имеет глубокие знания учебного материала по теме лабораторной работы, показывает усвоение взаимосвязи основных понятий используемых в работе, смог ответить на все уточняющие и дополнительные вопросы, демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме лабораторной работы, определяет взаимосвязи между показателями задачи, даёт правильный алгоритм решения, определяет междисциплинарные связи по условию задания.

- *Хорошо* выставляется, если обучающийся показал знание учебного материала, усвоил основную литературу, смог ответить почти полно на все заданные дополнительные и уточняющие вопросы. Обучающийся демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме лабораторной работы, допуская незначительные неточности при решении задач, имея неполное понимание междисциплинарных связей при правильном выборе алгоритма решения задания.

- *Удовлетворительно* выставляется, если обучающийся в целом освоил материал лабораторной работы, ответил не на все уточняющие и дополнительные вопросы, обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, даёт неполный ответ, требующий наводящих вопросов преподавателя, выбор алгоритма решения задачи возможен при наводящих вопросах преподавателя.

- *Неудовлетворительно* выставляется обучающемуся, если он имеет существенные пробелы в знаниях основного учебного материала лабораторной работы, который полностью не раскрыл

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

## **1.2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации**

### **Список вопросов к зачету**

1. Классификация лекарственных препаратов.
2. Биологическая активность. Спектр биологической активности. Взаимосвязь строения и биологической активности химических соединений.
3. Понятия: *me - too drug, through - put screening, hit compound, building block*, изоостеры, биоизоостеры.
4. Дизайн физиологически активных веществ. Структурные особенности мутагенов.

5. Структурно-информационный анализ химических соединений.
6. Рациональный драг-дизайн.
7. Основные принципы действия лекарственных средств.
8. Биологические молекулы в организме. Их функции.
9. Причины заболеваний. Биологические мишени действия БАВ (липиды, белки, нуклеиновые кислоты) и принципы создания структур их лигандов.
10. Белок – информационная молекула.
11. Антитела и антигены.
12. Структура ДНК, репликация.
13. Структура РНК, транскрипция.
14. Трансляция. Триплетный код.
15. Типы химических связей.
16. Классификация химических соединений с позиций клеточной морфологии.
17. Что происходит с веществом при попадании в организм. Механизмы действия.
18. Понятия фармакофора, *плацебо*. Агонисты и антагонисты.
19. Показатели БА. Понятие и определение величин  $EC_{50}$ ,  $IC_{50}$ ,  $ED_{50}$ ,  $LD_{50}$ .
20. Параметры структуры химических соединений.
21. Количественные соотношения строение – биологическая активность. Методология QSAR.
22. Докинг.

#### **Правила выставления оценки на зачете**

Устный ответ на зачете оценивается по 2-х балльной системе.

Отметка «**зачтено**» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- студент свободно владеет научной терминологией;
- ответ студента структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов по вопросу билета;
- логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ иллюстрируется примерами, в том числе из собственной практики;
- студент демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию.

Отметка «**незачтено**» ставится, если:

- обнаружено незнание или непонимание студентом сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов билета не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые студент не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию студент затрудняется дать ответ или не дает верных ответов.

## **Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Современные представления о структуре лекарственных веществ»**

### **Методические указания для студентов по освоению дисциплины**

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Современные представления о структуре лекарственных веществ» являются лекции. По всем темам предусмотрены лабораторные занятия, на которых происходит закрепление лекционного материала путем применения его к конкретным задачам и отработка навыков работы с химическими реактивами, проведения экспериментов и интерпретации их результатов.

Для успешного освоения дисциплины очень важно построение достаточно большого количества корреляционных зависимостей, как в аудитории, так и самостоятельно в качестве самостоятельных заданий. Примеры решения заданий разбираются на лекциях и лабораторных занятиях, при необходимости по наиболее трудным темам проводятся дополнительные консультации. Основная цель выполнения заданий – помочь усвоить фундаментальные понятия и основы количественной взаимосвязи между химическим строением и биологической активностью химических соединений. Для решения всех заданий необходимо знать и понимать лекционный материал. Поэтому в процессе изучения дисциплины рекомендуется регулярное повторение пройденного лекционного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дома еще раз прорабатывать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, лабораторных занятиях или из учебной литературы.

Большое внимание должно быть уделено выполнению отчетов о выполненных лабораторных исследованиях. В качестве заданий для самостоятельной работы дома студентам предлагаются задания, аналогичные разобранным на лекциях и лабораторных занятиях или немного более сложные, которые являются результатом объединения нескольких базовых задач.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала, приобретенных практических навыков работы в химической лаборатории, в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде собеседования в течение изучения дисциплины. Также проводятся консультации (при необходимости) по разбору заданий для самостоятельной работы, которые вызвали затруднения.

В конце изучения дисциплины студенты сдают зачет.

Освоить вопросы, излагаемые в процессе изучения дисциплины «Современные представления о структуре и действии лекарственных веществ», самостоятельно студенту крайне сложно. Это связано со сложностью изучаемого материала и большим объемом курса. Поэтому посещение всех аудиторных занятий является совершенно необходимым. Без упорных и регулярных занятий в течение семестра сдать зачет по итогам изучения дисциплины студенту практически невозможно.

### **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине**

В качестве учебно-методического обеспечения рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе № 8 данной рабочей программы.

Также рекомендуется использовать ряд интернет-ресурсов:

1. Химический факультет МГУ: <http://www.chem.msu.ru/>

Сайт содержит обширную информацию по различным учебным курсам по химии для студентов химических и нехимических факультетов. Приведены программы курсов, рекомендуемая литература и др.

2. Американское химическое общество: <http://www.acs.org/> и Королевское химическое общество: <http://www.rsc.org/>

Сайты содержат оглавление, рефераты и полнотекстовые файлы научных статей по различным направлениям химического знания.

Для самостоятельного подбора литературы в библиотеке ЯрГУ рекомендуется использовать:

**1. Личный кабинет** ([http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_login.php](http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_login.php)) дает возможность получения on-line доступа к списку выданной в автоматизированном режиме литературы, просмотра и копирования электронных версий изданий сотрудников университета (учеб. и метод. пособия, тексты лекций и т.д.) Для работы в «Личном кабинете» необходимо зайти на сайт Научной библиотеки ЯрГУ с любой точки, имеющей доступ в Internet, в пункт меню «Электронный каталог»; пройти процедуру авторизации, выбрав вкладку «Авторизация», и заполнить представленные поля информации.

**2. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ** ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)) содержит более 2500 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете. Доступ в сети университета, либо по логину/паролю.

**3. Электронная картотека «Книгообеспеченность»** ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_bookreq\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_bookreq_find.php)) раскрывает учебный фонд научной библиотеки ЯрГУ, предоставляет оперативную информацию о состоянии книгообеспеченности дисциплин основной и дополнительной литературой, а также цикла дисциплин и специальностей. Электронная картотека «Книгообеспеченность» доступна в сети университета и через Личный кабинет.