АВТОНОМНАЯ НЕКОММЕРЧЕСКАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»
(АНОО ВО «УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»)

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Сертификат: 0EE1DD57C56F53844743BD8E019F41EF
Владелец: Некрасова Людмила Андреевна
Действителен: с 08.07.2026 до 08.07.2027

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Специальная дисциплина по научной специальности 1.4.16. Медицинская химия

Шифр и наименование области науки:	1. Естественные науки
Шифр и наименование группы научных специальностей:	1.4 Химические науки
Шифр и наименование научной специальности:	1.4.16. Медицинская химия
Форма обучения:	Очная
Срок освоения образовательной программы:	4 года
Год начала освоения образовательной программы:	2026
Структурное подразделение, ответственное за реализацию образовательной программы:	Научный центр трансляционной медицины

АННОТАЦИЯ
к рабочей программе дисциплины (модулю)

Специальная дисциплина по научной специальности 1.4.16. Медицинская химия, трудоемкость 5 з.е.

1.1. Цель освоения и краткое содержание дисциплины (модуля)

Цель:

Формирование у аспирантов глубоких теоретических знаний и практических навыков в области медицинской химии, необходимых для участия в современных исследовательских проектах по разработке перспективных мишень-ориентированных лекарственных кандидатов в различных терапевтических областях.

Краткое содержание (тематика):

Введение в медицинскую химию. Ключевые семейства белковых биомишеней и принципы медицинско-химического дизайна действующих на них лекарственных соединений. Фармакокинетика, метаболизм, токсичность соединений и связанные с ними аспекты медицинско-химического дизайна. Стратегии медицинско-химического дизайна лекарственных кандидатов. Медицинско-химический дизайн лекарственных средств в актуальных терапевтических областях.

1.2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)

1.5.1. Сдан кандидатский экзамен по специальной дисциплине по научной специальности 1.4.16. «Медицинская химия».

1.5.2. Расширение и углубление личностных компетенций, а также формирование профессиональных компетенций, необходимых для создания, внедрения и совершенствования технологий, обеспечивающих опережающее научно-технологическое развитие страны:

– применение инновационных инструментов и методов при определении путей решения научных задач в области медицинской химии;

– умение анализировать и оценивать современные научные достижения, генерировать новые идеи при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;

– использование технических и инженерных решений основных задач исследовательской деятельности в области своих научных интересов;

– умение формулировать цели и задачи научных исследований на основе результатов поиска, обработки и анализа научно-технической информации.

1. Общая характеристика дисциплины

1.1. Цель дисциплины: формирование у магистранта глубоких теоретических знаний и практических навыков в области медицинской химии, необходимых для участия в современных исследовательских проектах по разработке перспективных мишень-ориентированных лекарственных кандидатов в различных терапевтических областях.

1.2. Задачи дисциплины:

– изучение современных подходов медицинской химии в сфере разработки химических соединений, преимущественно низкомолекулярных, являющихся потенциальными лекарственными кандидатами;

– освоение базовых концепций современной медицинской химии; основных классов биологических мишеней и принципов медицинско-химического дизайна действующих на них лекарственных соединений; теоретических и практических аспектов фармакокинетики, метаболизма и токсичности соединений в контексте разработки лекарственных средств; ключевых современных стратегий и технологий медицинско-химического дизайна лекарственных кандидатов; методов разработки лекарственных средств в актуальных терапевтических областях;

– выработка навыков понимания сложностей и особенностей принятия решений в многопараметрической медицинско-химической оптимизации, способности анализировать и критически оценивать встречающиеся в литературе результаты, инициации и ведения собственных исследовательских проектов по медицинско-химическому дизайну низкомолекулярных соединений-лидеров в различных терапевтических областях;

– получение ценных научно-практических результатов в области медицинско-химического дизайна патентоспособных мишень-ориентированных соединений-лидеров в актуальных терапевтических областях, которые способны стать отправной точкой для инициации научно-внедренческих проектов.

1.3. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры:

Дисциплина входит в образовательный компонент программы аспирантуры по научной специальности 1.4.16. «Медицинская химия».

Дисциплина является обязательной.

Дисциплина проводится в семестрах, установленных учебным планом и (или) индивидуальным учебным планом аспиранта.

Программа дисциплины «Медицинская химия» предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области органической химии, биохимии, аналитической химии и физики химических методов анализа, в частности.

1.4. Общая трудоемкость дисциплины: 5 з.е.

1.5. Планируемые результаты обучения по дисциплине:

1.5.1. Сдан кандидатский экзамен по специальной дисциплине по научной специальности 1.4.16. «Медицинская химия».

1.5.2. Расширение и углубление личностных компетенций, а также формирование профессиональных компетенций, необходимых для создания, внедрения и совершенствования технологий, обеспечивающих опережающее научно-технологическое развитие страны:

– применение инновационных инструментов и методов при определении путей решения научных задач в области медицинской химии;

– умение анализировать и оценивать современные научные достижения, генерировать новые идеи при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;

– использование технических и инженерных решений основных задач исследовательской деятельности в области своих научных интересов;

– умение формулировать цели и задачи научных исследований на основе результатов поиска, обработки и анализа научно-технической информации.

2. Структура и содержание дисциплины

2.1. Объем дисциплины и виды учебной деятельности:

Виды учебной деятельности	Всего
Контактная работа обучающихся с преподавателем, ак. ч.	72
Самостоятельная работа обучающихся, ак. ч.	108
Промежуточная аттестация, ак. ч.	4
Общая трудоемкость, ак. ч.	180
Общая трудоемкость, з.е.	5

2.2. Содержание разделов (тем) дисциплины:

Наименования разделов (тем) дисциплины	Содержание разделов (тем) дисциплины
Раздел 1. Введение в медицинскую химию	История возникновения и развития науки в мире и России. Предмет дисциплины. Ключевые определения и термины. Какие бывают лекарства, и как они действуют. Биомишени для действия лекарств: концептуальные понятия и определения, связь с заболеваниями и побочными эффектами. Биомишень как ключевая отправная точка для медицинско-химического дизайна. Локализация биомишеней. Ключевые типы биомишеней по химическому строению. Строение и функции липидных мембран. Части липидных мембран, которые могут служить мишенями для действия лекарств. Антиинфекционные и противоопухолевые лекарственные соединения, действующие на липидные мембраны. Ремоделирование мембран. Таргетирование липидных рафтов. Основные механизмы действия лекарств на нуклеиновые кислоты: интеркаляция, алкилирование, деструкция. Неканонические структуры нуклеиновых кислот как биомишени. Ключевые аспекты строения белков. Типы белков. Взаимодействия между лекарственным соединением и белковой биомишенью. Доноры и акцепторы водородной связи. Способность различных функциональных групп участвовать в формировании водородных и иных типов взаимодействий. Взаимодействия в сайте связывания биомишени и их конформационные последствия. Ключевые семейства белковых биомишеней. Теоретические аспекты действия ферментов как катализаторов биохимических реакций. Особенности строения активного центра

	ферментов. Основные каталитические механизмы. Конкурентное, неконкурентное, аллостерическое ингибирование. Примеры ингибиторов ферментов и механизмов их действия из современной практики. Теоретические аспекты лиганд-рецепторных взаимодействий. Агонисты и антагонисты, принципы дизайна. Сопутствующие эффекты. Мультитаргетность. Примеры агонистов и антагонистов рецепторов и механизмов их действия из современной практики.
Раздел 2. Ключевые семейства белковых биомишеней и принципы медицинско-химического дизайна действующих на них лекарственных соединений	Ион-канальные рецепторы: классификация, строение и принципы функционирования. Лиганд-зависимые ионные каналы. Потенциал-зависимые ионные каналы. Принципы дизайна и примеры лекарств. Рецепторы, связанные с G-белками: строение и принципы функционирования. Липоксигеназный и cAMP сигнальные каскады. Примеры и принципы дизайна лекарственных соединений, действующих на дофаминергическую и адренергическую системы. Сбои в сигнальных каскадах как одна из главных причин возникновения рака. Классификация, строение и принципы функционирования рецепторных тирозиновых киназ. Принципы и примеры дизайна ингибиторов киназ. Ядерные рецепторы: классификация, природные лиганды, пути биосинтеза. Строение и принципы функционирования. Примеры и принципы дизайна лекарственных соединений, действующих на ядерные рецепторы. Протеазные ферменты: строение и принципы функционирования, каталитические механизмы. Примеры и принципы дизайна лекарственных соединений, действующих на протеазы. Ингибиторы ВИЧ-протеазы. Ингибиторы NS3/4A протеазы вируса гепатита С. Ингибиторы главной протеазы SARS-CoV-2. Другие биомишени, вовлеченные в патогенез социально-значимых заболеваний. Примеры и принципы медицинско-химического дизайна действующих на них лекарственных соединений.
Раздел 3. Фармакокинетика, метаболизм, токсичность соединений и связанные с ними аспекты медицинско-химического дизайна	Теоретические и практические аспекты оптимизации ADME и физико-химических свойств. Биодоступность лекарственных соединений. Методы медицинско-химического дизайна, направленные на оптимизацию ADME и физико-химических свойств. Типы систем доставки и принципы их дизайна. Основные типы метаболических превращений лекарств. Пролекарства: типы, примеры. Дизайн, направленный на контроль метаболической стабильности. Примеры из современной практики. Аспекты безопасности лекарственных средств. Токсичность и побочные эффекты. Дизайн, направленный на увеличение безопасности лекарственных средств. Компьютерные методы прогнозирования ADME и физико-химических свойств, а также параметров безопасности. Методы компьютерной

	оценки «лекарство-подобия». Применение для направленного дизайна и оптимизации лекарственных средств.
Раздел 4. Стратегии медицинско-химического дизайна лекарственных кандидатов	Этапы разработки лекарственных средств. Особенности ранних, исследовательских этапов и роль медицинской химии в их реализации. Соединения-лидеры, лекарственные кандидаты. Критерии эффективности. Стратегии разработки соединений-лидеров. Биологический скрининг библиотек соединений. Скрининг, основанный на библиотеках фрагментов. Скрининг, основанный на библиотеках привилегированных хемотипов. Скрининг на основе фокусированных библиотек. Принципы комбинаторного синтеза. Компьютерные методы дизайна библиотек для биологического скрининга. Виртуальный скрининг и его связь с технологиями комбинаторного синтеза и биологического скрининга. Оптимизация соединений-лидеров: теоретические и индустриальные аспекты. Мультикритериальный подход к оптимизации. Основные подходы к оптимизации. Оптимизационные библиотеки. Дизайн соединений-лидеров, основанный на трансформации активных структур. Особенности стратегии. Биоизостерные аналоги, варьирование заместителей, вариации циклов, фармакофорные аналоги, упрощение природного скэффолда, работа с асимметрическими центрами. Дизайн, основанный на глубоких трансформациях соединения-прототипа. Циклизация, макроциклизация, ригидификация цепи, деригидификация. Реструктуризация циклических систем. Примеры из современной практики. Компьютерные методы дизайна, основанного на аналогах. Разработка бифармакофорных лекарственных конструкций. Типы и принципы дизайна. Дуально-стерическая модуляция. Пролекарственные бифармакофорные конструкции. Гибридные структуры. Дизайн лекарственных конъюгатов, содержащих лиганды узнавания, для обеспечения таргетного действия лекарств. Типы конъюгатов, принципы действия. Цели и принципы направленной деградации белковых структур, вовлеченных в патогенез. Ключевые современные подходы к дизайну соединений, обеспечивающих направленную деградацию. Технология PROTAC и другие методы направленной деградации. Дизайн лекарственных средств категории «следующий в классе» как рациональная современная стратегия разработки инновационных лекарств. Исторические примеры. Теоретические аспекты. Современные индустриальные примеры. Технологизация подхода. Этапы дизайна, их задачи, особенности и проблемы.
Раздел 5. Медицинско-химический дизайн	Разработка противовирусных, антибактериальных, противогрибковых, противоопухолевых, противовоспалительных, антидиабетических, сердечно-сосудистых, ЦНС-активных лекарств.

лекарственных средств в актуальных терапевтических областях	Основные биомишени, типы препаратов и механизмы их действия. Проблема резистентности в дизайне антиинфекционных и противоопухолевых лекарственных средств и способы ее решения. Ключевые аспекты дизайна мишень-ориентированных лекарственных средств в указанных терапевтических областях. Инновационные подходы, связанные с таргетной доставкой, направленной деградацией, дуально-стерической модуляцией, дизайном пролекарственных конструкций. Актуальные примеры из современной российской и зарубежной практики.

3. Текущий контроль и промежуточная аттестация по дисциплине. Оценочные материалы

3.1. Текущий контроль успеваемости по дисциплине проводится в течение семестра в следующих формах:

Наименования разделов (тем) дисциплины	Форма текущего контроля	Оценочные материалы
Раздел 1. Введение в медицинскую химию	Написание эссе по первоисточникам на иностранных языках	Примерные темы эссе
Раздел 2. Ключевые семейства белковых биомишеней и принципы медицинско-химического дизайна действующих на них лекарственных соединений	Написание эссе по первоисточникам на иностранных языках	Примерные темы эссе
Раздел 3. Фармакокинетика, метаболизм, токсичность соединений и связанные с ними аспекты медицинско-химического дизайна	Написание эссе по первоисточникам на иностранных языках	Примерные темы эссе
Раздел 4. Стратегии медицинско-химического дизайна лекарственных кандидатов	Написание эссе по первоисточникам на иностранных языках	Примерные темы эссе
Раздел 5. Медицинско-химический дизайн лекарственных средств в актуальных терапевтических областях	Написание эссе по первоисточникам на иностранных языках	Примерные темы эссе

3.2. Оценочные материалы для текущего контроля:

3.2.1. Примерные темы эссе:

Раздел 1:

1. Современные противоопухолевые лекарственные соединения, действующие на липидные мембраны.
2. Мультитаргетность как принцип дизайна современных ЦНС-активных лекарственных средств.
3. Неканонические структуры нуклеиновых кислот как биомишени.

Раздел 2:

1. Современные примеры и принципы дизайна лекарственных соединений, действующих на аминергические GPCR.
2. Примеры и принципы дизайна ингибиторов киназных ферментов, одобренных ведущими национальными регуляторными ведомствами в 2022-23 годах.
3. Ингибиторы главной протеазы SARS-CoV-2: актуальные разработки.

Раздел 3:

1. Дизайн, направленный на увеличение метаболической стабильности: примеры из современной практики.
2. Дизайн, направленный на снижение взаимодействий с hERG: примеры из современной практики.
3. Принципы прогнозирования побочных эффектов лекарственных средств.

Раздел 4:

1. Биоизостеры моноциклических ароматических систем: современные примеры.
2. Макроциклизация как подход к дизайну аналогов: принципы и актуальные примеры.
3. Замена атома H на атомы F: теоретические и практические аспекты.

Раздел 5:

1. Новые биомишени в разработке противовирусных соединений.
2. Проблема резистентности в дизайне антибактериальных лекарственных средств и способы ее решения.
3. Инновационные противогрибковые препараты: примеры, механизмы действия.

Критерии оценивания эссе:

При оценке эссе оцениваются актуальность привлеченных источников, глубина их анализа, умение обобщать и структурировать информацию и пр.

«Отлично»	«Хорошо»	«Удовлетворительно»	«Неудовлетворительно»
– полно раскрыто содержание вопроса; – материал изложен грамотно, в определенной логической последовательности, точно используется терминология; – показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами, применять их в новой ситуации; – продемонстрировано усвоение ранее изученных сопутствующих вопросов.	– ответ удовлетворяет в основном требованиям на оценку «5» (отлично), 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.	– неполно или непоследовательно раскрыто содержание материала, но показано общее понимание вопроса и продемонстрированы умения, достаточные для дальнейшего усвоения материала; – имеются затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, исправленные после нескольких наводящих вопросов преподавателя.	– 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 преподавателя; не сформированы необходимые компетенции, умения и навыки.

3.3. Формой промежуточной аттестации по дисциплине является кандидатский экзамен.

Результатом промежуточной аттестации в форме кандидатского экзамена являются оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно».

Кандидатский экзамен проводится в соответствии с установленным в АНОО ВО «Университет «Сириус» порядком.

3.4. Оценочные материалы для промежуточной аттестации:

3.4.1. Примерный перечень вопросов к кандидатскому экзамену:

Экзаменационный билет состоит из двух вопросов: 1) теоретического; 2) прикладного. Ниже представлены примеры вопросов, относящихся к каждому из указанных типов.

Первый вопрос в экзаменационном билете:

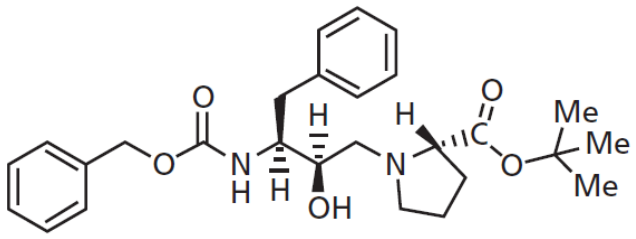
1. Биомишень для действия лекарства. Для чего медицинскому химику нужно знать биомишень?
2. Ключевые типы и особенности биомишеней по химическому строению.
3. Липидные мембраны как биомишени. Особенности и ограничения.
4. Принципы дизайна лекарств, действующих на липидные мембраны. Примеры лекарств. Механизмы действия амфотерицина и ванкомицина.
5. Нуклеиновые кислоты как биомишени. Особенности и ограничения.
6. Белки как биомишени. Особенности и факторы значимости в разработке лекарств.
7. Принципы дизайна лекарств, действующих на нуклеиновые кислоты. Примеры лекарств.
8. Принцип действия ДНК-алкилаторов. Примеры лекарств.
9. Ферменты как биомишени. Особенности действия.
10. Принципы дизайна антагонистов ферментов. Типы антагонистов.
11. Рецепторы как биомишени. Особенности действия.
12. Принципы дизайна антагонистов рецепторов. Типы антагонистов.
13. Принципы дизайна агонистов рецепторов. Типы агонистов.
14. Побочные эффекты лекарств, связанные с антагонизмом рецепторов.
15. Понятие о мультитаргетности. Влияние на разработку лекарств.
16. Структура и механизм функционирования рецепторов семейства GPCR. Аденилат-циклазный каскад.
17. Структура и механизм функционирования рецепторов семейства GPCR. Липазный каскад.
18. Структура и механизм функционирования рецепторных тирозиновых киназ.
19. Принципы дизайна лекарств, действующих на GPCR биомишени, на примере агонистов дофаминовых рецепторов.
20. Принципы дизайна лекарств, действующих на GPCR биомишени, на примере агонистов и антагонистов адренорецепторов.
21. Принципы дизайна лекарств, действующих на рецепторные тирозиновые киназы. Примеры.
22. Типы ингибиторов рецепторных тирозиновых киназ.
23. Силы, участвующие в формировании третичной структуры белка. Силы участвующие в связывании лиганда с активным центром биомишени.
24. Методы идентификации и валидации биомишеней.
25. Понятие об аллостерической регуляции. Примеры лекарств, действующих по механизму аллостерической регуляции.

26. Понятие о неконкурентном (ковалентном) ингибировании ферментов и рецепторов. Примеры лекарств.
27. Роль оптимизации ADME-параметров в разработке лекарственных соединений.
28. Принципы медицинско-химического дизайна, направленные на оптимизацию ADME и физико-химических свойств.
29. Типы систем доставки и принципы их дизайна.
30. Основные типы метаболических превращений лекарств.
31. Принципы и задачи дизайна пролекарства. Типы пролекарственных конструкций.
32. Принципы и задачи дизайна, направленный на контроль метаболической стабильности.
33. Принципы дизайна, направленного на увеличение безопасности лекарственных средств.
34. Принципы компьютерного прогнозирования ADME и физико-химических свойств.
35. Принципы компьютерной оценки «лекарство-подобия».
36. Этапы разработки лекарственных средств. Особенности ранних, исследовательских этапов и роль медицинской химии в их реализации.
37. Соединения-лидеры, лекарственные кандидаты. Определения, критерии эффективности.
38. Стратегии разработки соединений-лидеров.
39. Биологический скрининг библиотек соединений как ключевая современная технология идентификации соединения-лидера. Виды библиотек.
40. Скрининг, основанный на библиотеках фрагментов: принципы и задачи.
41. Скрининг, основанный на библиотеках привилегированных хемотипов: принципы и задачи.
42. Скрининг на основе фокусированных библиотек: принципы и задачи.
43. Принципы комбинаторного синтеза. Основные концепции и технологии.
44. Основные компьютерные методы дизайна библиотек для биологического скрининга. Виртуальный скрининг и его связь с технологиями комбинаторного синтеза и биологического скрининга.
45. Оптимизация соединений-лидеров: основные принципы. Мультикритериальный подход к оптимизации.
46. Дизайн соединений-лидеров, основанный на трансформации активных структур. Принципы и особенности стратегии.
47. Принципы и основные типы дизайна биоизостерных аналогов.
48. Принципы и подходы к дизайну и оптимизации, связанные с варьированием заместителей и циклов.
49. Принципы и подходы к дизайну и оптимизации, связанные с упрощением природного скэффолда и работой с асимметрическими центрами.
50. Принципы и подходы к дизайну и оптимизации, связанные с глубокими трансформациями соединения-прототипа: циклизация, макроциклизация, ригидификация цепи, деригидификация.
51. Принципы и подходы к дизайну и оптимизации, связанные с реструктуризацией циклических систем.
52. Принципы компьютерного дизайна, основанного на аналогах.
53. Принципы дизайна, основанного на репозиционировании известных лекарственных соединений.
54. Разработка бифармакофорных лекарственных конструкций: типы и принципы дизайна.
55. Принципы дизайна на основе дуально-стерической модуляции биомишеней.

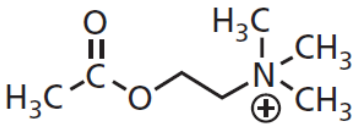
56. Принципы дизайна лекарственных конъюгатов, содержащих лиганды узнавания, для обеспечения таргетного действия лекарств. Типы конъюгатов.
57. Цели и принципы направленной деградации белковых структур, вовлеченных в патогенез. Технология PROTAC.
58. Теоретические и практические аспекты медицинско-химического дизайна на основе природных молекул.
59. Дизайн лекарственных средств категории «следующий в классе» как рациональная современная стратегия разработки инновационных лекарств. Индустриальные примеры.
60. Этапы дизайна лекарственных средств категории «следующий в классе», их задачи, особенности и проблемы.
61. Разработка противовирусных лекарственных средств. Основные биомишени, примеры препаратов и механизмы их действия.
62. Разработка антибактериальных лекарственных средств. Основные биомишени, примеры препаратов и механизмы их действия.
63. Разработка противоопухолевых лекарственных средств. Основные биомишени, примеры препаратов и механизмы их действия.
64. Разработка противовоспалительных лекарственных средств. Основные биомишени, примеры препаратов и механизмы их действия.
65. Разработка антидиабетических лекарственных средств. Основные биомишени, примеры препаратов и механизмы их действия.
66. Разработка сердечно-сосудистых лекарственных средств. Основные биомишени, примеры препаратов и механизмы их действия.
67. Проблема резистентности в дизайне антиинфекционных и противоопухолевых лекарственных средств и способы ее решения.

Второй вопрос в экзаменационном билете:

1. Опишите принципы дизайна следующей структуры ингибитора протеазы ВИЧ:

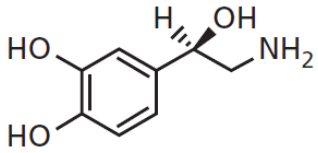


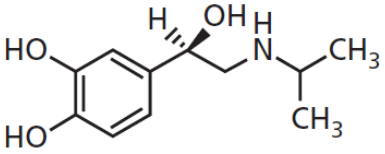
2. Опишите функции «каталитической триады» протеазных ферментов.
3. Нарисуйте полную структуру L-аланил-L-фенилаланил-глицина.
4. Опишите роль бис-D-аланинового фрагмента в построении клеточной стенки бактерий.
5. Опишите возможные внутри- и межмолекулярные взаимодействия боковых цепей серина, фенилаланина, глицина, лизина, тирозина.
6. Ацетилхолин, показанный ниже, является субстратом ацетилхолинэстеразы (АХЭ).



Назовите продукты этой ферментативной реакции. Предположите, какие взаимодействия происходят между ацетилхолином и активным центром АХЭ.

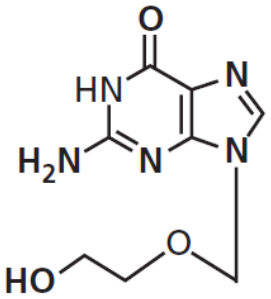
7. Существуют два основных типа адренорецепторов: α и β. Норадреналин, показанный ниже, имеет небольшую селективность действия по отношению к α-типу; изопреналин, также показанный ниже, имеет существенную селективность к β-типу; адреналин в одинаковой степени связывается с обоими типами.



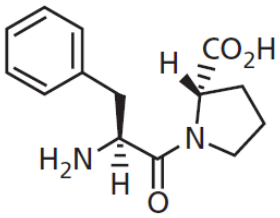


Объясните причины указанных различий в селективности.

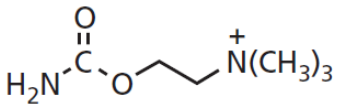
8. Опишите механизм действия следующего противовирусного соединения:



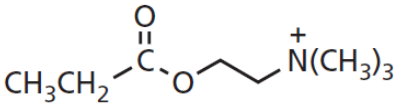
9. Протеаза ВИЧ способна расщеплять пептидные связи между остатками фениланина и пролина. Предположите, отталкиваясь от структуры следующего дипептида, потенциальные ингибиторы протеазы ВИЧ.



10. Структура I является антагонистом холинергического рецептора, тогда как структура II не оказывает на него никакого влияния. Объясните причины.

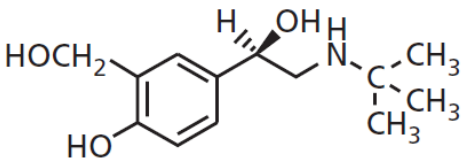


(I)

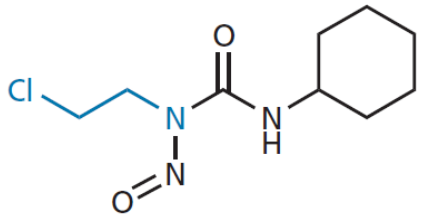


(II)

11. R-сальбутамол, показанный ниже, является антиастматическим средством. Предположите, на какой тип адренорецепторов он селективно действует, и обоснуйте ответ.

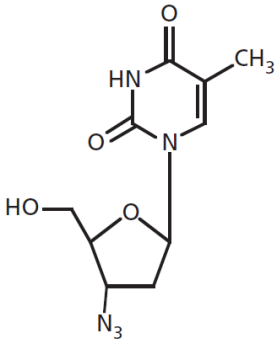


12. Ниже представлена структура противоопухолевого соединения ломустин.

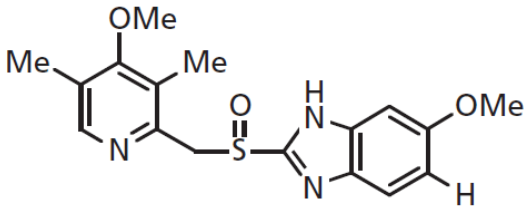


Укажите, к какому типу препаратов по механизму действия он относится и на какие биомишени действует.

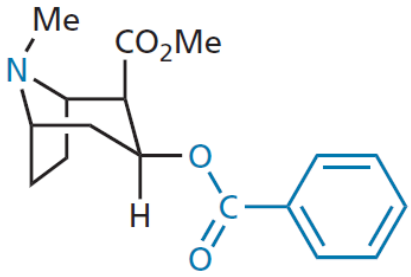
13. Опишите механизм действия цисплатина.
14. Представленная ниже структура – это важное противовирусное соединение. Как оно называется? Каков механизм его действия?



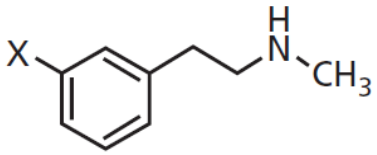
15. Фенольная группа морфина играет важную роль в связывании морфина с опиоидными рецепторами, которое вызывает анальгезию. Кодеин имеет ту же структуру, что и морфин, но фенольная группа замаскирована метиловым эфиром. В результате кодеин плохо связывается с опиоидными рецепторами in vitro. Однако, когда его принимают in vivo, он проявляет полезные анальгетические свойства. Объясните причины.
16. Предположите возможные метаболиты ингибитора протонного насоса омепразола:



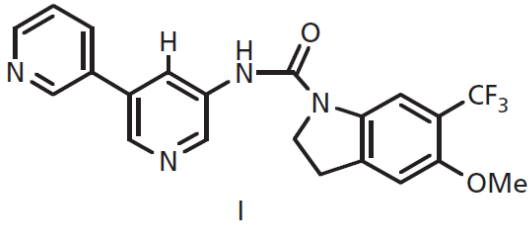
17. Нарисуйте биоизостеры фрагмента мочевины.
18. Нарисуйте пять возможных гетероциклических биоизостеров сложноэфирной группы.
19. Нарисуйте известные Вам нециклические биоизостеры амидной группы.
20. Нарисуйте известные Вам биоизостеры фенола.
21. Нарисуйте известные Вам неклассические биоизостеры эстрадиола.
22. Представьте возможности ригидификации структур, не связанные с образованием циклов.
23. Представьте принцип дизайна структур с конформационной блокировкой. Назовите известные Вам примеры лекарственных соединений с указанной структурной особенностью.
24. Предположите аналоги кокаина (представлен ниже), сохраняющие его фармакологическую активность.



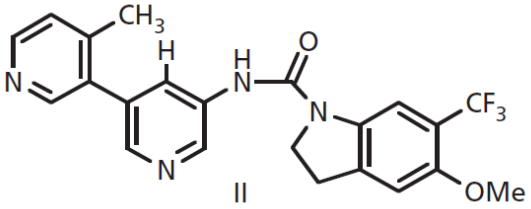
25. Предложите варианты ригидификации следующей структуры. Объясните возможные фармакологические последствия предложенных трансформаций.



26. Структура I является антагонистом серотонина. Метильная группа была введена в аналог II, что привело к увеличению активности. Какую роль играет метильная группа? В чем причины увеличения активности?

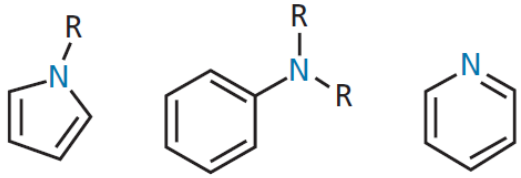


I

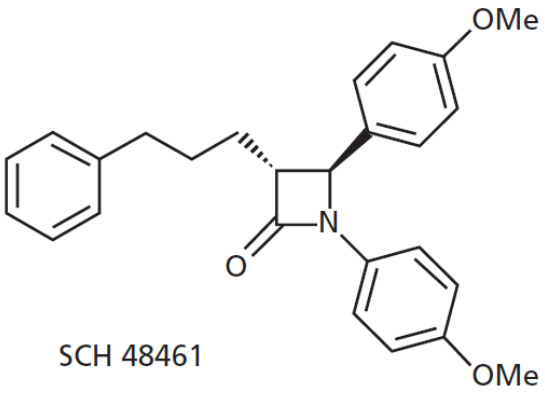


II

27. Сравните способность трех указанных ниже структур являться акцепторами водородной связи.



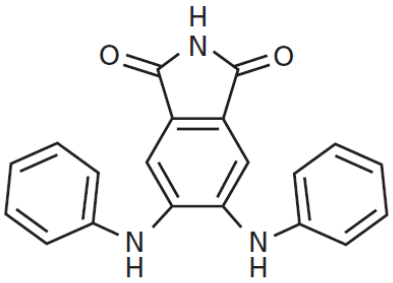
28. Было установлено, что SCH 48461 снижает уровень холестерина путем ингибирования его всасывания. К сожалению, это соединение подвержено метаболизму. Определите вероятные метаболические реакции, которым может подвергнуться эта молекула, и какие модификации можно внести, чтобы уменьшить склонность к метаболизму.



SCH 48461

29. CGP 52411 является полезным ингибитором фермента протеинкиназы. Исследования взаимосвязи структура-активность показывают, что заместители в ароматических

кольцах, такие как Cl, Me или OH, снижают активность. Исследования метаболизма показывают, что происходит пара-гидроксилирование с образованием неактивных метаболитов. Как бы Вы изменили структуру, чтобы защитить ее от метаболизма?



CGP52411

30. Опишите механизм действия и ключевые зависимости «структура-свойства» сульфаниламидных антибиотиков.

Критерии оценки ответов на вопросы кандидатского экзамена:

«Отлично»	«Хорошо»	«Удовлетворительно»	«Неудовлетворительно»
– обнаружил глубокое знание основного учебно-программного материала в соответствии с прослушанным лекционным курсом, основной и дополнительной литературой, в полном объеме, необходимом для предстоящей работы по специальности; – демонстрирует глубокое, всестороннее знание и понимание сущности рассматриваемых терминов, понятий, закономерностей и пр.; – свободно владеет научным стилем речи; его ответ характеризует точное, связное, последовательное, логичное, обоснованное и аргументированное изложение материала; – умеет формулировать обоснованные выводы.	– обнаружил твердое знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для предстоящей работы по специальности; – демонстрирует хорошее знание рассматриваемых терминов, понятий, закономерностей и пр.; – владеет научным стилем; его ответ характеризует точное, связное, последовательное, логичное изложение материала; – умеет формулировать выводы.	– обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для предстоящей работы по специальности; – демонстрирует нечеткое представление о сущности рассматриваемых терминов, понятий, закономерностей и пр.; – слабо владеет научным стилем; его ответ характеризует неточное изложение программного материала, – испытывает трудности с формулированием выводов.	– обнаружил значительные пробелы в знаниях основного учебного материала; – демонстрирует непонимание сущности рассматриваемых терминов, понятий, закономерностей и пр.; – не владеет научным стилем речи; не умеет формулировать выводы.

4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

4.1. Перечень основной литературы:

1. G.L. Patrick. An Introduction to Medicinal Chemistry, 5th Edition, 2013.

2. C.G. Wermuth. The Practice of Medicinal Chemistry, 4th Edition, 2015.

3. G. Thomas, Medicinal chemistry: an introduction, 2nd Edition, 2007.

4. T. Nogrady, D. F. Weaver, Medicinal Chemistry: A Molecular and Biochemical Approach. OxfordUniversityPress, 2005.

4.2. Перечень дополнительной литературы:

1. Граник В. Г. Основы медицинской химии. М.: Вузовская книга, 2006.

2. N. Brown, R. Mannhold, H. Kubinyi, G. Folkers. Bioisosteres in Medicinal Chemistry, Methods and Principles in Medicinal Chemistry, V. 54, John Wiley and Sons, Hoboken, 2012.

3. N. Brown. Scaffold Hopping in Medicinal Chemistry. Methods and Principles in Medicinal Chemistry, V. 58, Wiley-VCH, Weinheim, 2014.

4. А. В. Бабков, Химия в медицине : учебник для вузов / А. В. Бабков, О. В. Нестерова ; под редакцией В. А. Попкова. — Москва : Издательство Юрайт, 2026. — 403 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-9916-8279-4. — URL : https://urait.ru/bcode/583430;

5. Е. В. Коноплева, Клиническая фармакология. Тесты : учебное пособие для вузов / Е. В. Коноплева. — Москва : Издательство Юрайт, 2026. — 123 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-19912-3. — URL : https://urait.ru/bcode/588462;

6. Е. В. Коноплева, Фармакология : учебник для вузов / Е. В. Коноплева. — 4-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2026. — 434 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-20886-3. — URL : https://urait.ru/bcode/590618;

7. В. П. Комов, Биохимия : учебник для вузов / В. П. Комов, В. Н. Шведова ; под общей редакцией В. П. Комова. — 4-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2026. — 684 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-13939-6. — URL : https://urait.ru/bcode/588486;

8. Ю. А. Ершов, Биохимия : учебник и практикум для вузов / Ю. А. Ершов, Н. И. Зайцева ; под редакцией С. И. Щукина. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2026. — 323 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-07505-2. — URL : https://urait.ru/bcode/583838;

9. Е.В. Коноплева, Клиническая фармакология : учебник и практикум для вузов / Е. В. Коноплева. — Москва : Издательство Юрайт, 2026. — 692 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-18742-7. — URL : https://urait.ru/bcode/589245;

4.3. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

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

2. Система библиографического цитирования Scopus - Режим доступа: http://www.scopus.com/

4.4. Перечень современных профессиональных баз данных и ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - Режим доступа: http://biblioclub.ru/

2. Электронная библиотечная система ZNANIUM.COM - Режим доступа: https://znanium.com/

3. Электронно-библиотечная система издательства «Юрайт» - Режим доступа: https://urait.ru/

4. Научная электронная библиотека eLibrary - Режим доступа: http://elibrary.ru/

5. Материально-техническое и программное обеспечение дисциплины

5.1. Материально-техническое обеспечение

Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Вид аудитории	Технические средства и оборудование
Учебная аудитория для проведения лекционных занятий	Компьютер с проектором. Маркерная доска, маркер. Учебная мебель. Рабочее место преподавателя.
Учебная аудитория для проведения практических занятий – компьютерный класс с доступом в интернет	Компьютер с проектором. Компьютеры для студентов. Маркерная доска, маркер. Учебная мебель. Рабочее место преподавателя.

5.2. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения:
MS Windows, MS Office, Acrobat Reader DC, АнтивирусКасперского.