Приложение № 4
к образовательной программе высшего образования – программе магистратуры
по направлению подготовки 04.04.01 Химия
(направленность (профиль) «Современные материалы и химические технологии в медицине»)

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

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ
Сертификат: 7835bcdac1c89a3da835a18f6045494f3f404337
Владелец: Некрасова Людмила Андреевна
Действителен: с 08.07.2026 до 08.07.2027

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

«Медицинская химия»

1. Трудоемкость дисциплины (модуля): 10 з.е.

2. Место дисциплины (модуля) в учебном плане:

Часть, формируемая участниками образовательных отношений, «Профессиональной подготовки» – «Дисциплины (модули) специализации (Медицинская химия)» в рамках Блока 1. Дисциплины (модули), реализуется во 2–3 семестрах.

3. Цель дисциплины (модуля): формирование у обучающихся комплексных знаний о принципах и методах рационального дизайна биологически активных соединений, развитие компетенций в области поиска, оптимизации и разработки потенциальных лекарственных средств на основе понимания взаимосвязи между химической структурой молекул и их фармакологическим действием.

4. Задачи дисциплины (модуля):

– сформировать систему знаний о молекулярных мишенях лекарственных средств (рецепторы, ферменты, ионные каналы, нуклеиновые кислоты);

– изучить принципы взаимодействия «лиганд — биологическая мишень» на молекулярном уровне;

– освоить закономерности связи «структура — активность» (SAR) и «структура — свойства» (SPR);

– сформировать понимание основ фармакокинетики (ADME) и ее влияния на дизайн лекарств;

– изучить современные стратегии поиска соединений-лидеров (высокопроизводительный скрининг, фрагментный подход, виртуальный скрининг);

– освоить методы оптимизации соединений-лидеров и повышения их «лекарственноподобности»;

– изучить подходы компьютерного моделирования и молекулярного докинга в дизайне лекарств;

– рассмотреть стратегии модификации структуры для улучшения фармакокинетических свойств;

– развить навыки анализа и интерпретации данных SAR для серий биологически активных соединений;

– сформировать умение прогнозировать метаболизм и потенциальную токсичность органических соединений;

– научить критически анализировать научную и патентную литературу в области разработки лекарств;

– ознакомить с этапами доклинических исследований и требованиями к кандидатам в лекарственные средства;

– развить междисциплинарное мышление на стыке химии, биологии и фармакологии.

5. Перечень разделов (тем) дисциплины (модуля) и их краткое содержание:

Наименование раздела (темы) дисциплины (модуля)	Краткое содержание
Раздел 1. Введение в медицинскую химию	История возникновения и развития в мире и России. Предмет дисциплины. Ключевые определения и термины. 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.

Наименование раздела (темы) дисциплины (модуля)	Краткое содержание
	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. cAMP и липоксигеназный 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

Наименование раздела (темы) дисциплины (модуля)	Краткое содержание
	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.

Наименование раздела (темы) дисциплины (модуля)	Краткое содержание
	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 лекарственных средств в актуальных терапевтических областях	Разработка противовирусных, антибактериальных, противогрибковых, противоопухолевых, противовоспалительных, антидиабетических, сердечно-сосудистых, ЦНС-активных лекарств. Основные биомишени, типы препаратов и механизмы их

Наименование раздела (темы) дисциплины (модуля)	Краткое содержание
	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.

6. Образовательные результаты освоения дисциплины (модуля):

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
ПК-1. Способен применять знания в области биохимии, органической, коллоидной, косметической и медицинской химии для постановки и решения исследовательских и практических задач, связанных с разработкой лекарственных препаратов на основе малых молекул и коллоидных биоматериалов	ИПК-1.1. Знает фундаментальные основы биохимии, органической, коллоидной, косметической и медицинской химии
	ИПК-1.2. Применяет знания в области биохимии, органической, коллоидной, косметической и медицинской химии для постановки и решения исследовательских и практических задач
	ИПК-1.3. Анализирует современные проблемы в области медицины и биотехнологии, формулирует гипотезы и вырабатывает подходы для решения исследовательских и практических задач, связанных с разработкой лекарственных препаратов на основе малых молекул и коллоидных биоматериалов
ПК-2. Способен применять методы органической и коллоидной химии для разработки лекарственных препаратов на основе малых молекул и коллоидных биоматериалов	ИПК-2.1. Знает современные методы, используемые для разработки лекарственных препаратов на основе малых молекул и коллоидных биоматериалов
	ИПК-2.4. Применяет современные подходы к дизайну биологически активных малых молекул и коллоидных биоматериалов
	ИПК-2.5. Применяет методы синтеза новых соединений с использованием современных методов органической и коллоидной химии

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
ПК-4. Способен разрабатывать лекарственные препараты на основе малых молекул и коллоидные биоматериалы в соответствии с современными регуляторными требованиями, а также разрабатывать методы контроля их качества	ИПК-4.1. Знает нормативно-правовую базу Российской Федерации в сфере фармацевтической деятельности
	ИПК-4.2. Применяет знания о современных требованиях к качеству, безопасности и эффективности новых лекарственных препаратов и биоматериалов
ПК-5. Способен проводить экспериментальные исследования по разработке новых биологически активных малых молекул и коллоидных биоматериалов с использованием высокотехнологичного лабораторного оборудования	ИПК-5.1. Знает инновационные экспериментальные методы исследования в области дизайна, синтеза и анализа новых биологически активных молекул и коллоидных биоматериалов
	ИПК-5.3. Формулирует новые идеи и гипотезы при разработке новых биологически активных малых молекул и коллоидных биоматериалов
ПК-6. Способен анализировать, интерпретировать, оформлять и представлять результаты научно-исследовательской работы в области медицинской химии и коллоидных биоматериалов	ИПК-6.1. Критически анализирует и оценивает современные научные достижения, в том числе в междисциплинарных областях
	ИПК-6.5. Участвует в профессиональных дискуссиях, аргументирует свои заключения на основе анализа методологии, используемой для исследования, существующих проблем и открытых вопросов в соответствующей области, научной литературы и собственных экспериментальных данных