

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ КОНСТРУИРОВАНИЯ
ОРГАНИЧЕСКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ**

Кафедра физической и органической химии
химического факультета

Образовательная программа:

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: **Органическая химия**

Уровень высшего образования: **Специалитет**

Форма обучения: **Очная**

Статус дисциплины: **вариативная по выбору**

Махачкала, 2020 г.

Рабочая программа дисциплины “Современные методы конструирования органических лекарственных веществ” составлена в 2020 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (уровень специалитета) от 12 сентября 2016 года №1174.

Разработчик: д.х.н., профессор кафедры физической и органической химии Абдуллаев М.Г.

Рабочая программа дисциплины одобрена:
на заседании кафедры физической и органической химии
от «19» 02 2020г., протокол № 6.

Зав. кафедрой И.М. Абдулагатов проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета

от «21» февраля 2020г., протокол № 6.

Председатель У.Г. Гасангаджиева доц. Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим

управлением «26» 03 2020г. А.Б.
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина «Современные методы конструирования органических лекарственных веществ» входит в *вариативную* по выбору часть Б.1.В.ДВ.7.2 образовательной программы специалитета 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия».

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с подготовкой химика, способного применить теоретические знания и практические навыки, полученные в области синтетической органической химии и компьютерной химии, в разработке новых стратегических подходов, позволяющих планировать и осуществлять целенаправленный поиск молекулярных структур, новых, или путем модифицирования, уже известных, органических лекарственных веществ (целевой органический синтез), в том числе с применением современного арсенала методов компьютерного моделирования биологической активности химических соединений.

Дисциплина нацелена на формирование следующих профессиональных компетенций выпускника: ПК-1, ПК-2, ПК-5, ПК-7.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: *лекции, лабораторные занятия*.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме *отчетов по лабораторным работам, контрольных работ и коллоквиумов, устный опрос, письменный опрос, тестирование* и промежуточный контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 3 зачетных единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий:

Семестр	Учебные занятия в том числе						СРС, в том числе экзамен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференцированный зачет, экзамен)
	Всего	Контактная работа обучающихся с преподавателем из них				КСР		
		Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия		консультации		
7	108	18	18				72	зачет

1. Цели освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины «Современные методы конструирования органических лекарственных веществ» – подготовка студента, способного применить теоретические знания и практические навыки, полученные в области синтетической органической химии и компьютерной химии, в разработке новых стратегических подходов, позволяющих планировать и осуществлять целенаправленный поиск молекулярных структур, новых или путем модифицирования уже известных, органических лекарственных веществ (целевой органический синтез), в том числе с применением современного арсенала методов компьютерного моделирования биологической активности химических соединений.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП бакалавриата

Дисциплина «Современные методы конструирования органических лекарственных веществ» входит в *вариант ивную по выбору* часть Б.1.В.ДВ.7.2 образовательной программы специалитета 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия».

В информационном и логическом планах дисциплина «Современные методы конструирования органических лекарственных веществ» последовательно развивает дисциплину «Органическая химия», поэтому требует от студентов знаний из области органической химии, умений проведения лабораторных работ, интерпретации результатов, полученных при выполнении лабораторных работ, работать с компьютером и компьютерными химическими прикладными программами. Освоение данной дисциплины необходимо для выполнения курсовых и дипломных работ, а так же для закрепления углубленных профессиональных навыков.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Код компетенции из ФГОС ВО	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения
ПК-1	Способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты	Знает: современные направления в исследованиях механизмов органических реакций, современные методы диагностики механизмов органических реакций и их теоретическое обоснование, - современные теоретические основы ароматичности, Умеет: оценивать возможности современных методов теоретического анализа и экспериментальных способов диагностики механизмов органических реакций, Владеет: учебной, научной и справочной литературой в области теоретической органической химии вообще и механизмов органических реакций в частности.
ПК-2	Владением навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Знает: иметь представление о современном лабораторном оборудовании, применяемом в каталитическом синтезе; Умеет: необходимо уметь оценивать и реализовать возможности современного и классического оборудования в современном катализе; Владеет: навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований.
ПК-5	Способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владением ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественно-научное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций	Знает: современные квантовохимические методы оценки реакционной способности органических соединений; Умеет: реализовать кинетические методы в решении проблем органической химии; -проводить качественную и количественную оценку влияния заместителей и растворителя на реакционную способность исследуемых органических субстратов на основе корреляционного анализа экспериментальных данных Владеет: структурно-функциональным подходом к оценке свойств и реакционной способности органических соединений
ПК-7	Готовностью представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической науч-	Знает: классификацию реакций и реагентов на основе их структуры и вытекающих из нее свойств, классификацию, структуру и реакционную способность интермедиатов органических реакций и методы их обнаружения Умеет: проводить диагностику механизма исследуемой реакции, устанавливать тип реакции и возможные интермедиаты на основе теоретических представлений органической химии и анализа экспериментальных данных Владеет: теоретическими основами химической кинетики, экспериментальными методиками выполнения кинетических из-

	ной печати)	мерений и обработки полученных данных с помощью специальных компьютерных программ
--	-------------	---

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 академических часа.

4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	Се- местр	Неде- ля се- мест- ра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоем- кость (в часах)				Са мо сто ятель- ная раб .	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной атте- стации (по семестрам)
				Лек .	Пра кт. зан.	Лаб.	Кон тр сам		
Модуль 1. История предмета и современное состояние процесса конструирования лекарственных веществ. Стратегии создания лекарственных веществ									
1	Тема 1. История предме- та и современное состоя- ние процесса конструи- рования лекарственных веществ	7	1,2	2		2		8	Устный опрос, письмен- ный опрос, тестирование, коллоквиум, доклады и др.
2	Тема 2. Связь курса с другими науками. Общие вопросы химии лекар- ственных веществ..	7	3-5	2		2		8	Устный опрос, письмен- ный опрос, тестирование, коллоквиум, доклады и др.
3	Тема 3. Эмпирическое конструирование новых лекарственных препара- тов.	7	6-8	2		2		8	Устный опрос, письмен- ный опрос, тестирование, коллоквиум, доклады и др.
	Итого по модулю 1:	7	1-8	6		6		24	Коллоквиум
Модуль 2. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ алифатическо- го и алициклического ряда									
4	Тема 1. Основы совре- менного компьютерного моделирования. Хими- ческие базы данных.	7	9,10	2		2		8	Устный опрос, письмен- ный опрос, тестирование, коллоквиум, доклады и др.
5	Тема 2. Эксперимен- тальные методы кон- струирования (синтеза) некоторых классов ле- карственных органиче- ских веществ.	7	11- 13	2		2		8	Устный опрос, письмен- ный опрос, тестирование, коллоквиум, доклады и др.
6	Тема 3. Синтез лекар- ственных веществ али- фатического ряда. Син- тез лекарственных ве- ществ алициклического ряда.	7	14,15	2		2		8	Устный опрос, письмен- ный опрос, тестирование, коллоквиум, доклады и др.
	Итого по модулю 2:		9-15	6		6		24	Коллоквиум
Модуль 3. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ ароматическо- го и гетероциклического ряда									
7	Тема 1. Синтез лекар- ственных веществ аро- матического ряда.	7	16,18	4		4		12	Устный опрос, письмен- ный опрос, тестирование, коллоквиум, доклады и др.
8	Тема 2. Синтез лекар- ственных веществ гете- роциклического ряда	7	19	2		2		12	Устный опрос, письмен- ный опрос, тестирование, коллоквиум, , доклады и др.
	Итого по модулю 3:	7	16-19	6		6		24	Коллоквиум
	Итого:	7	1-19	18		18		72	1зачет

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине.

Модуль 1. История предмета и современное состояние процесса конструирования лекарственных веществ. Стратегии создания лекарственных веществ

Тема 1. История предмета и современное состояние процесса конструирования лекарственных веществ (drug design - конструирование лекарственных веществ). Основные термины и понятия. Классификация лекарственных средств. Государственная Фармакопея. Фармакопейная статья. Установление подлинности. Органические лекарственные препараты различной структуры: Алифатические препараты, алициклические, ароматические и гетероароматические лекарственные средства. Характеристика некоторых терапевтически важных групп лекарственных веществ.

Тема 2. Связь курса с другими науками. Общие вопросы химии лекарственных веществ. Система GR. Направления поиска. Методы поиска новых препаратов (модификация структур, копирование известных соединений, поиск антиметаболитов, создание комбинированных препаратов, копирование известных препаратов). Эволюция органической химии лекарственных веществ. Общие вопросы стратегии разработки, синтеза и исследования лекарственных препаратов. Связь структура – биологическая активность.

Тема 3. Эмпирическое конструирования новых лекарственных препаратов. Молекулярное моделирование в поиске лекарственных веществ. Общая схема разработки нового лекарственного вещества. Тотальный («through put») скрининг. Поиск новых и совершенствование известных соединений-лидеров (lead-compounds). Оптимизация соединения – лидера. Связь структура – биологическая активность. Моделирование фармакокинетических и токсикологических свойств лекарственных веществ (ADMET - Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity).

Модуль 2. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ алифатического и алициклического ряда

Тема 1. Основы современного компьютерного моделирования. Химические базы данных. Качественная зависимость «строение – биоактивность» SAR (Structure – Activity Relationship - соотношение структура – активность). Количественные соотношения «структура – активность»: QSAR (Quantitative Structure – Activity Relationship или количественное соотношение структура – активность). COMFA (Comparative Molecular Field Analysis или сравнительный анализ молекулярных полей). Создание биоизостерических соединений. Создание пролекарств (pro-drug). Создание «мягких лекарств» (soft drugs). Создание «двойных лекарств» (twin drugs).

Тема 2. Экспериментальные методы конструирования (синтеза) некоторых классов лекарственных органических веществ. Химическая схема синтеза как основа разработки технологии. Факторы, определяющие технологичность процесса (экономика, экологическая безопасность, принципы «зеленой химии»), Планирование синтеза. Технологические аспекты проведения реакции.

Тема 3. Синтез лекарственных веществ алифатического ряда. Синтез лекарственных веществ алициклического ряда. Галогенирование. Использование органических реакций в синтезе лекарственных препаратов.

Модуль 3. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ ароматического и гетероциклического ряда

Тема 1. Синтез лекарственных веществ ароматического ряда. Реакции в ароматическом кольце и боковой цепи. Сульфирование. Примеры препаратов, содержащих сульфогруппу.

Тема 2. Синтез лекарственных веществ гетероциклического ряда. Синтез противоопухолевых веществ группы азиридина и оксирана. Антибиотики, содержащие четырехчленное азетидиновое ядро. Пенициллины и цефалоспорины. Лекарственные вещества на основе пятичленных гетероциклов.

4.3.2. Содержание лабораторных занятий по дисциплине.

№	Содержание лабораторной работы	Часы
Модуль 1. История предмета и современное состояние процесса конструирования лекарственных веществ. Стратегии создания лекарственных веществ		
1	Лабораторная работа № 1. Определение галогенов в лекарственных органических веществах. Определение подлинности лекарственных форм. Синтез катализаторов	4
Модуль 2. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ алифатического и алициклического ряда		
2	Лабораторная работа № 2. Синтез, компьютерное и молекулярное моделирование лекарственных органических веществ алифатического ряда. Синтез, компьютерное и молекулярное моделирование лекарственных органических веществ алициклического ряда. Синтез, компьютерное и молекулярное моделирование производных ароматического ряда - п-аминофенола, бензойной кислоты и их производных	6
Модуль 3. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ ароматического и гетероциклического ряда		
3	Лабораторная работа № 3. Синтез, компьютерное и молекулярное моделирование производных ароматического ряда - п-аминобензойной кислоты, 2,6-диметиланилина и 2,4, 6-триметиланилина и их производных. Синтез, компьютерное и молекулярное моделирование производных ароматического ряда - салициловой п-аминосалициловой и сульфаниловой кислоты и их производных	4
4	Лабораторная работа № 4. Синтез, компьютерное и молекулярное моделирование производных гетероциклического ряда - 5-нитрофурфурола, пиридин-3-карбоновая и пиридин-4-карбоновая кислота и их производных	4

5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки бакалавров широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики сочетания с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС ВО предусматривается использование при проведении занятий по предмету следующих активных методов обучения:

- выполнение лабораторных работ с элементами исследования;
- отчетные занятия по разделам;
- компьютерное молекулярное моделирование;
- решение задач.

Удельный вес занятий, проводимых в интерактивных формах, составляет 12 ч. от аудиторных занятий. Занятия лекционного типа (лекция-беседа, лекция-дискуссия, лекция консультация, проблемная лекция) составляет 30% аудиторных занятий.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

Формы и виды самостоятельной работы студентов по дисциплине устанавливаются следующие:

- самостоятельное изучение дополнительных тем с последующим разбором на практическом занятии;
- подготовка к лабораторным занятиям;
- подготовка к промежуточному контролю;
- написание рефератов и подготовка к их защите;
- подготовка к зачету.

Разделы и темы для самостоятельного изучения	Виды и содержание самостоятельной работы	Учебно-методич. обеспечение
Модуль 1. История предмета и современное состояние процесса конструирования лекарственных веществ. Стратегии создания лекарственных веществ		
Тема 1. История предмета и современное состояние процесса конструирования лекарственных веществ	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
Тема 2. Связь курса с другими науками. Общие вопросы химии лекарственных веществ..	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
Тема 3. Эмпирическое конструирование новых лекарственных препаратов.	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
Модуль 2. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ алифатического и алициклического ряда		
Тема 1. Основы современного компьютерного моделирования. Химические базы данных.	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
Тема 2. Экспериментальные методы конструирования (синтеза) некоторых классов лекарственных органических веществ.	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
Тема 3. Синтез лекарственных веществ алифатического ряда. Синтез лекарственных веществ алициклического ряда.	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
Модуль 3. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ ароматического и гетероциклического ряда		
Тема 1. Синтез лекарственных веществ ароматического ряда.	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.	См. разделы 6.2, 7.3, 8, 9 данного документа.
Тема 2. Синтез лекарственных веществ гетероциклического ряда	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования приведен в описании образовательной программы.

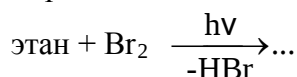
Код компетенции из ФГОС ВО	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты	Знает: современные направления в исследованиях механизмов органических реакций, современные методы диагностики механизмов органических реакций и их теоретическое обоснование, - современные теоретические основы ароматичности Умеет: оценивать возможности современных методов теоретического анализа и экспериментальных способов диагностики механизмов органических реакций Владеет: учебной, научной и справочной литературой в области теоретической органической химии вообще и механизмов органических реакций в частности.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум
ПК-2	владением навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Знает: иметь представление о современном лабораторном оборудовании, применяемом в каталитическом синтезе Умеет: необходимо уметь оценивать и реализовать возможности современного и классического оборудования в современном катализе Владеет: навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
ПК-5	способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций	Знает: современные квантовохимические методы оценки реакционной способности органических соединений Умеет: реализовать кинетические методы в решении проблем органической химии; -проводить качественную и количественную оценку влияния заместителей и растворителя на реакционную способность исследуемых органических субстратов на основе корреляционного анализа экспериментальных данных Владеет: структурно-функциональным подходом к оценке свойств и реакционной способности органических соединений	Устный опрос, письменный опрос

ПК-7	готовностью представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)	Знает: классификацию реакций и реагентов на основе их структуры и вытекающих из нее свойств, классификацию, структуру и реакционную способность интермедиатов органических реакций и методы их обнаружения Умеет: проводить диагностику механизма исследуемой реакции, устанавливать тип реакции и возможные интермедиаты на основе теоретических представлений органической химии и анализа экспериментальных данных Владеет: теоретическими основами химической кинетики, экспериментальными методиками выполнения кинетических измерений и обработки полученных данных с помощью специальных компьютерных программ	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
------	--	--	--

7.2. Типовые контрольные задания.

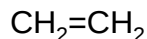
Типовые тестовые задания

1. Напишите уравнение реакции и назовите образующийся продукт:



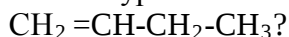
1) 1-бромэтан 2) 1,2-дибромэтан 3) 1,1-дибромэтан 4) 1,1,2,2-тетрабромэтан

2. Какова гибридизация атомов углерода в молекуле алкена:



1) sp^3 2) sp^2 3) sp 4) не гибридизованы

3. Какое из названий соединения составлено правильно по правилам международной номенклатуры?



1) 1-бутен 2) этилэтилен 3) 2-бутен 4) 1-бутин

4. Какое из названий соединения составлено по правилам международной номенклатуры?



1) 1-бутин 2) 2-бутин 3) 1-бутен 4) 2-бутен

5. Какой валентный угол имеет атом углерода у тройной связи?

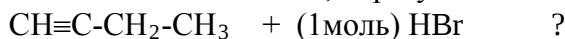
1) $109^\circ 28'$ 2) 120° 3) 180° 4) 60°

6. Какова гибридизация атомов углерода в следующей молекуле у тройной связи:



1) sp 2) sp^3 3) sp^2 4) не гибридизованы

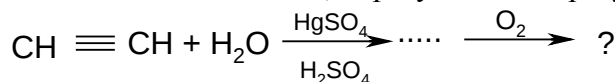
7. Назовите соединение, образующееся по реакции с учетом правила Марковникова:



1) 2-бром-1-бутен 3) 2-бромбутан

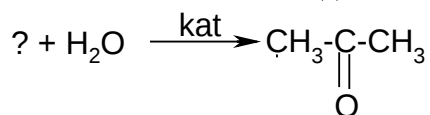
2) 1-бром-1-бутен 4) 1-бромбутан

8. Назовите соединение, образующееся в результате превращения



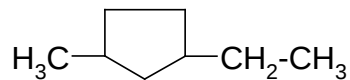
1) этиловый спирт 2) уксусный альдегид 3) уксусная кислота 4) уксусно-этиловый эфир

9. Из какого алкина соединения можно по реакции Кучерова получить ацетон?



1) метилен 2) этилен 3) пропилен 4) метилацетилен

10. Какое название имеет соединение?



1) 1-метил-2-этилциклопентан 2) 1-метил-3-этилциклопентан 3) 1,2-диметилциклопентанон
4) 1-метил-4-этилциклопентанон

Типовой перечень вопросов к зачету

1. История предмета и современное состояние процесса конструирования лекарственных веществ (drug design - конструирование лекарственных веществ).
2. Связь курса с другими науками. Общие вопросы химии лекарственных веществ. Современные требования к лекарственным веществам. Стандартизация лекарственных препаратов и принципы оценки качества синтезируемых лекарственных веществ.
3. Стратегии создания лекарственных веществ
4. Эмпирическое конструирования новых лекарственных препаратов. Молекулярное моделирование в поиске лекарственных веществ. Общая схема разработки нового лекарственного вещества. Тотальный («through put») скрининг. Поиск новых и совершенствование известных соединений-лидеров (lead-compounds). Оптимизация соединения –лидера. Связь структура – биологическая активность. Моделирование фармакокинетических и токсикологических свойств лекарственных веществ (ADMET - Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity).
5. Основы современного компьютерного моделирования. Химические базы данных. Качественная зависимость «строение – биоактивность» SAR (Structure – Activity Relationship - соотношение структура – активность). Количественные соотношения «структура – активность»: QSAR (Quantitative Structure – Activity Relationship или количественное соотношение структура – активность).
6. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ алифатического и алициклического ряда
7. Экспериментальные методы конструирования (синтеза) некоторых классов лекарственных органических веществ.
8. Синтез лекарственных веществ алифатического ряда. Синтез лекарственных веществ алициклического ряда.
9. Экспериментальные методы конструирования органических лекарственных веществ ароматического и гетероциклического ряда
10. Синтез лекарственных веществ ароматического ряда.
11. Синтез лекарственных веществ гетероциклического ряда
12. COMFA (Comparative Molecular Field Analysis или сравнительный анализ молекулярных полей). Создание биоизостерических соединений. Создание пролекарств (pro-drug). Создание «мягких лекарств» (soft drugs). Создание «двойных лекарств» (twin drugs).
13. Контрольно-разрешительная система РФ.
14. Международные стандарты, обеспечивающие качество лекарственных средств (GMP, GLP, GMP, GPP).
15. Метрология в фармацевтическом анализе. Валидация.
16. Методы молекулярного моделирования в дизайне лекарственных препаратов.
17. Использование химических баз данных в дизайне лекарственных препаратов.

18. Двумерный и трехмерный субструктурный поиск в дизайне лекарственных препаратов.
19. Молекулярные дескрипторы в дизайне лекарственных препаратов.
20. Методы поиска трехмерных фармакофоров.
21. Молекулярный докинг в дизайне лекарственных препаратов.
22. Количественные соотношения структура–активность в дизайне лекарственных препаратов.
23. Методы поиска новых соединений-«лидеров» в дизайне лекарственных препаратов.
24. Особенности контроля качества лекарственных средств на основе антрахинонов (антрасенин, сенаде, сенадексин, глаксена, кафиол).
25. Контроль качества препаратов группы индола.
26. Анализ лекарственных препаратов, содержащих гуанидиновую группу (амилорид, октадин, гуанфацин, гуанабенз, сульгин, фамотидин).
27. Анализ лекарственных препаратов и лекарственных форм, содержащих витамины (кислота аскорбиновая, кислота никотиновая, тиамина бромид, пиридоксина гидрохлорид, кислота фолиевая, рибофлавин и др.).
28. Анализ лекарственных препаратов и лекарственных форм, содержащих гормоны мозгового слоя надпочечников (адреналина и норадреналина гидротартрат), коркового слоя надпочечников (дезоксикортикостерона и кортизона ацетат), половые гормоны (метилтестостерон, тестостерона пропионат, этилэстрадиол).
29. Анализ лекарственных препаратов и лекарственных форм, содержащих антибиотики (пенициллины, тетрациклины, стрептомицины).
30. Современные проблемы стандартизации фитопрепаратов.

Перечень тем рефератов

1. Контрольно-разрешительная система РФ. Международные стандарты, обеспечивающие качество лекарственных средств (GGP, GLP, GMP, GPP).
2. Метрология в фармацевтическом анализе. Валидация.
3. Методы молекулярного моделирования в дизайне лекарственных препаратов.
4. Использование химических баз данных в дизайне лекарственных препаратов.
5. Двумерный и трехмерный субструктурный поиск в дизайне лекарственных препаратов.
6. Молекулярные дескрипторы в дизайне лекарственных препаратов.
7. Методы поиска трехмерных фармакофоров.
8. Молекулярный докинг в дизайне лекарственных препаратов.
9. Количественные соотношения структура–активность в дизайне лекарственных препаратов.
10. Методы поиска новых соединений-«лидеров» в дизайне лекарственных препаратов.

7.3. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля - 70% и промежуточного контроля - 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий - 5 баллов,
- выполнение лабораторных заданий – 30 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос - 30 баллов,
- письменная контрольная работа - 30 баллов,
- тестирование - 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса, изучавшимся в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Солдатенков, Анатолий Тимофеевич. Основы органической химии лекарственных веществ [Текст] / Солдатенков, Анатолий Тимофеевич, Н. М. Колядина. - 3-е изд. - М. : Мир: БИНОМ. Лаб. знаний, 2007. - 190,[1] с. - [Химия]. - ISBN 5-03-003794-2 (Мир) : 138-00.
2. Номенклатура химических соединений и лекарственных средств: учебное пособие / авт.-сост. А.В. Аксенов, О.Е. Самсонов, И.В. Маликова, Н.А. Аксенов и др. - Ставрополь : СКФУ, 2016.- 266 с.: ил.; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=459125>
3. Инструментальный анализ биологически активных веществ и лекарственных средств : учебное пособие / Г.Б. Слепченко, В.И. Дерябина, Т.М. Гиндуллина, и др. - Томск : Издательство Томского политехнического университета, 2015. - 198 с. : ил., табл., схем. - Библиогр. в кн. ; То же [Электронный ресурс]. - URL:

б) дополнительная литература:

1. Ключев М.В., Абдуллаев М.Г. Каталитический синтез аминов [Текст]. Иваново: Издательство ИвГУ. 2004. - 160 с. ISBN 5-7807-0476-7. Местонахождение: Научная библиотека ДГУ.
2. Новые пути органического синтеза : практ. использ. переход. металлов [Текст] / [Х.М.Колхуан, Д.Холтон, Д.Томпсон, М.Твигг]; пер. с англ. М.С.Ермоленко, В.Г.Киселева. - М. : Химия, 1989. - 399,[1] с. : ил. ; 22 см. - Библиогр.: с 375-400. - 3-80. Местонахождение: Научная ДГУ.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. Электронные образовательные ресурсы образовательного сервера ДГУ elib.dgu.ru.
2. Moodle[Электронный ресурс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг. гос. ун-т. – Махачкала, г. – Доступ из сети ДГУ или, после регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет. – URL: <http://moodle.dgu.ru>
3. Электронный каталог НБ ДГУ[Электронный ресурс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ/Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>, свободный
4. Авторский раздел «Органическая химия» на образовательном портале Moodle ДГУ [Электронный ресурс]: edu.dgu.ru.
5. Авторский блог «Органическая химия» [Электронный ресурс]: orghimia.blogspot.com
6. Сайт МГУ [Электронный ресурс] <http://www.chem.msu.su/rus/>
7. Главная страница по фармацевтической химии [Электронный ресурс] <http://farmchem.ru>
8. ЭБС ibooks.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://ibooks.ru/>
9. ЭБС book.ru[Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: www.book.ru/
10. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html>

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

Разделы и темы для самостоятельного изучения	Виды и содержание самостоятельной работы
История предмета и современное состояние процесса конструирования лекарственных веществ. Эмпирическое конструирование новых лекарственных препаратов.	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.
Основы современного компьютерного моделирования. Химические базы данных.	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.

Синтез лекарственных веществ гетероциклического ряда	Проработать лекционный материал. Решить задачи по данной теме. Подготовиться к выполнению и сдаче лабораторной работы. Подготовить реферат по заданной теме.
--	---

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются аудитория оснащенная компьютером и видеопроектором, программное обеспечение:

1. Программа для ЭВМ Microsoft Imagine Premium, 3 years, Renewal. Производитель: Microsoft Corporation Товарный знак: Майкрософт Корпорейшн (Microsoft®) Страна происхождения: Ирландия. Контракт №188-ОА, «21» ноября 2018 г.

2. Acrobat Professional 9 Academic Edition и Acrobat Professional 9 DVD Set Russian Windows ГК №26-ОА от «07» декабря 2009 г

3. ChemOffice Professional Academic Edition (приложение № 2 к Государственному контракту №26-ОА от «07» декабря 2009 г.)

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

В соответствии с требованиями ФГОС ВО кафедра имеет специально оборудованные лаборатории для проведения лабораторных работ и учебные аудитории для проведения лекционных занятий по потокам студентов. Обеспечение дисциплины осуществляется кафедрой физической и органической химии химического факультета и включает в себя приборы для физико-химического анализа (спектрофотометрия, кондуктометрия, газожидкостная хроматография и пр., вычислительная техника, химическое программное обеспечение (программы 3D Viever, MDL ISIS, 7.0 Origin, HyperChem 7.5, Gaussian 98, 03 и др).