

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

2.1.6.
(индекс дисциплины)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Медицинская химия

(наименование дисциплины)

по научной специальности

1.4.16 Медицинская химия

Форма обучения: очная

Год набора: 2026

Общая трудоемкость: 3 ЗЕ

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	6	Итого
Форма контроля	экзамен	
Вид занятий		
Лекции	6	6
Лабораторные	2	2
Практические	-	-
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР	-	-
Промежуточная аттестация	0,5	0,5
Контактная работа	8,5	8,5
Самостоятельная работа	64	64
Контроль	35,5	35,5
Итого	108	108

Рабочую программу составил(и):

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

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

Рецензирование рабочей программы дисциплины:



Отсутствует



Рецензент

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

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГТ и учебного плана
научной специальности

1.4.16 Медицинская химия

Срок действия рабочей программы дисциплины до «31» августа 2030 г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании центра медицинской химии
(протокол заседания № 1 от «28» августа 2025 г.).

1. Цель освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины «Медицинская химия» расширить и углубить фундаментальные представления о молекулярном дизайне, физиологически-активных соединений с заданными фармакокинетическим и фармакодинамическим профилями.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Дополнительные главы медицинской химии», «Молекулярное моделирование физиологически активных веществ».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Научная деятельность 7,8».

3. Планируемые результаты обучения

Знать:

- основные подходы молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов;
- классификацию лекарственных препаратов и их основные сферы применения;
- основные подходы *in vitro* исследования, применяемых при разработке биологически активных соединений;
- основные методы молекулярно-биологического и биохимического исследования биологической активности органических соединений *in vitro*;
- основы молекулярного высокопроизводительного докинга, QSAR-анализ, ADMET предсказание;
- основные методологические подходы используемые при молекулярном дизайне с применением специализированного программного обеспечения

Уметь:

- выбрать оптимальные пути развития синтеза для решения поставленных задач;
- используя знания в области органического синтеза планировать и осуществлять сложные многостадийные синтетические схемы получения фармакологически активных соединений;
- планировать отдельные стадии молекулярно-биологического и биохимического исследования биологической активности соединений *in vitro*;
- проводить и интерпретировать результаты эксперимента по оценке заданного вида биологической активности органических соединений *in vitro*;
- планировать эксперименты по молекулярному моделированию биологически активных соединений;
- проводить эксперименты по молекулярному моделированию биологически активных соединений.

Владеть:

- основными методологическими подходами, базирующимися на понимании основных количественных соотношений, структура-свойство, а также о строении биологической мишени, для конструирования лекарственных препаратов;
- структурно-ориентированным и лиганд-ориентированным подходом для конструирования биологически активного соединения заданной структуры;
- рядом молекулярно-биологических и биохимических исследований биологической активности органических соединений *in vitro*;

- основными инструментальными методами молекулярно-биологического и биохимического исследования биологической активности органических соединений *in vitro*;
- приемами конструирования биологически активных соединений с заданным фармакологическим и токсикологическим профилем;
- навыками работы на основных открытых программных продуктах, предназначенных для молекулярного моделирования.

4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
Модуль 1.	Лек 1	Медицинская химия в действии. Открытие ингибиторов с новым механизмом действия	6	2	-	-	-
	Лаб 1	Дизайн дуальных ингибиторов киназ	6	3	-	-	-
	Лек 2	Медицинская химия в действии. Структурно-ориентированный дизайн и разработка дуальных ингибиторов для перорального и ингаляционного приема. Ингибиторы МАР-киназы как клинические кандидаты	6	2	-	-	-
	Лек 3	Медицинская химия в действии. Открытие ряда терапевтических препаратов.	6	2	-	-	-
	Ср	Изучение лекционного материала и оригинальной литературы.	6	64	-	-	-
	ПА	Промежуточная аттестация	6	0,5	-	-	
	Контроль	Подготовка к экзамену	6	35,5	-	-	Вопросы к экзамену № 1-60
Итого:				108			

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины используется технология традиционного обучения – организация учебного процесса в вузе, основанная на лекционно-лабораторных формах обучения. Основная нагрузка приходится на самостоятельную работу.

6. Методические указания по освоению дисциплины

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

Самостоятельная работа реализуется:

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

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

7. Оценочные средства

7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
6		Вопросы к экзамену №№ 1-60

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

7.2.1. Вопросы для самостоятельного изучения

№ п/п	Вопросы для самостоятельного изучения
1	Представление о лекарствах. Современная систематика лекарственных средств.
2	Избирательное действие лекарств и его значение.
3	Механизмы действия лекарственных средств.
4	Классификация видов действия лекарств.
5	Мишени лекарств: рецепторы, ферменты, ионные каналы, транспортные системы.
6	Межмолекулярные взаимодействия.
7	Представление о лигандах.
8	Механизмы связывания лиганда с рецептором.
9	Аффинность лигандов.
10	Селективные и неселективные лиганды.
11	Бивалентные лиганды.
12	Агонисты и антагонисты.
13	Фармакокинетика лекарственных средств.
14	Биодоступность лекарств. Роль связывания с белками крови.
15	Механизмы всасывания лекарств в организме.

16	Распределение лекарств в организме.
17	Комбинаторной и параллельный синтез в проектах медицинской химии.
18	Техника твердофазного синтеза.
19	Планирование и проектирование сложных комбинаторных библиотек.
20	Тестирование биологической активности.
21	Параллельный синтез.
22	Комбинаторный синтез.
23	Молекулярный докинг.
24	Биологическая активность и конформационный анализ.
25	De novo дизайн лекарств.
26	История и разработка метода QSAR
27	Биологические данные. Аддитивность вкладов группы
28	Параметры и характеризующие их индексы
29	Количественные модели. Дополненный термодинамический подход. Анализ Ганча. Аддитивная модель. Свободный анализ Вильсона. Нелинейные зависимости
30	Статистические методы. Значимость и достоверность QSAR уравнений регрессии
31	Конструкция серии испытаний в QSAR
32	Применение Анализа Ганча. Ингибиторы ферментов. Фармакокинетические данные.
33	Применение свободного анализа Вильсона и прочих моделей.

7.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 6

№ п/п	Вопросы к экзамену
1	Представление о лекарствах. Современная систематика лекарственных средств.
2	Избирательное действие лекарств и его значение.
3	Механизмы действия лекарственных средств.
4	Классификация видов действия лекарств.
5	Мишени лекарств: рецепторы.
6	Мишени лекарств: ферменты.
7	Мишени лекарств: ионные каналы.
8	Мишени лекарств: транспортные системы.
9	Межмолекулярные взаимодействия.
10	Представление о лигандах.
11	Механизмы связывания лиганда с рецептором.
12	Аффинность лигандов.
13	Селективные и неселективные лиганды.
14	Бивалентные лиганды.
15	Агонисты и антагонисты.
16	Фармакокинетика лекарственных средств.
17	Фармакодинамика лекарственных средств.
18	Биодоступность лекарств. Роль связывания с белками крови.
19	Механизмы всасывания лекарств в организме.
20	Распределение лекарств в организме.
21	Комбинаторной и параллельный синтез в проектах медицинской химии.
22	Техника твердофазного синтеза.

23	Планирование и проектирование сложных комбинаторных библиотек.
24	Тестирование биологической активности.
25	Параллельный синтез.
26	Комбинаторный синтез.
27	Молекулярный докинг.
28	Биологическая активность и конформационный анализ.
29	De novo дизайн лекарств.
30	История и разработка метода QSAR
31	Биологические данные. Аддитивность вкладов группы
32	Параметры и характеризующие их индексы
33	Количественные модели. Дополненный термодинамический подход. Анализ Ганча
34	Количественные модели. Аддитивная модель. Свободный анализ Вильсона
35	Количественные модели. Нелинейные зависимости
36	Статистические методы. Значимость и достоверность QSAR уравнений регрессии
37	Конструкция серии испытаний в QSAR
38	Применение Анализа Ганча. Ингибиторы ферментов. Фармакокинетические данные.
39	Применение свободного анализа Вильсона и прочих моделей.
40	3D-QSAR. Стереохимия и действие лекарственного вещества
41	3D-QSAR. Модель активного сайта связывания
42	3D-QSAR. Метод сравнительного анализа молекулярных полей
43	3D-QSAR. Метод сравнительного анализа индексов молекулярного подобия
44	3D-QSAR основанный на рецепторе
45	Ингибиторы киназ. Функции, регулируемые процессы, номенклатура и строение киназ. Ингибиторы I и II типа.
46	Ингибиторы киназ. СЕРТ-ингибиторы: особенности открытия и рационального дизайна. Открытие и механизм действия Анацетрапида.
47	Ингибиторы киназ. Особенности рационального дизайна и открытия дуальных ингибиторов киназ.
48	Ингибиторы киназ. Разработка дуального ингибитора p38a MAPK / PDE-4. Стратегия открытия и оптимизации. Преимущества и недостатки дуального механизма действия.
49	Ингибиторы киназ. Стратегии открытия и рационального дизайна АТФ-конкурентных киназных ингибиторов. Проблемы селективности киназных ингибиторов и нецелевое связывание.
50	Ингибиторы киназ. Возникновение резистентности к терапии киназными ингибиторами при раке. Стратегии преодоления устойчивости. Аллостерические ингибиторы.
51	Ингибиторы киназ. Киназные мишени терапии заболеваний ЦНС. Примеры мишеней и связанные патологии.
52	Ингибиторы киназ. Нацеливание на Rho-ассоциированную киназу. Открытие и дизайн фасудила и Y-27632.
53	Ингибиторы киназ. Киназные мишени в иммунной системе. Разработка и дизайн селективного ингибитора PI3Kδ Селеталисиба.
54	Фрагмент-ориентированный дизайн лекарств. Понятие об FBDD, идеология и методы оптимизации фрагментов.
55	Фрагмент-ориентированный дизайн лекарств. In silico методы FBDD. Молекулярный докинг и скрининг фрагментов и дальнейшая оптимизация.
56	Фрагмент-ориентированный дизайн лекарств. Открытие и оптимизация ингибиторов фосфолипазы A2 методами FBDD в качестве терапевтических агентов против ишемической болезни сердца.

57	Структурно-ориентированный дизайн. Открытие и дизайн препаратов для лечения гепатита.
58	Структурно-ориентированный дизайн. Открытие, методы дизайна и оптимизации мощных и селективных нестероидных модуляторов глюкокортикоидных рецепторов AZD5423 и AZD7594
59	Медицинская химия в действии. Методы in vivo изучения PK/PD свойств в рамках доклинических исследований. Используемые модели животных. Понятие об этике исследований.
60	Медицинская химия в действии. Доклинические исследования препаратов для лечения малярии. Изучение PK/PD свойств и токсичности KAE609 in vivo.

7.3.2. Критерии и нормы оценки

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

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Балыклова К.С., Власов А.М., Гегечкори В.И.	Фармацевтическая химия : учебник / К. С. Балыклова, А. М. Власов, В. И. Гегечкори [и др.] ; под редакцией Г. В. Раменской. – 2-е изд. – Москва : Лаборатория знаний, 2025. – 638 с. – ISBN 978-5-93208-911-8. – Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. – URL: https://www.iprbookshop.ru/141316.html	Учебник	2025	Цифровой образовательный ресурс IPR SMART
2	Клопов В.М.Ю Першина О.В.	Органическая химия. Для фармацевтических и химико-биологических специальностей вузов: Учебное пособие для вузов : учебник для вузов / М. И. Клопов, О. В. Першина. - 2-е изд., стер. - Санкт-Петербург : Лань, 2025. - 148 с. - ISBN 978-5-507-54237-6	Учебное пособие	2025	ЭБС «Лань»
3	Жауэн Ж., Бек В., Дж. Макглинчи М. и др.	Биометаллоорганическая химия / Ж. Жауэн, В. Бек, Дж. М. Макглинчи [и др.] ; под редакцией Ж. Жауэн ; перевод В. П. Дядченко, К.В. Зайцев. – 3-е изд. – Москва : Лаборатория знаний, 2020. – 503 с. – ISBN 978-5-00101-668-7. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная	Учебное пособие	2020	ЭБС «IPRbooks»

		система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/37021.html			
4	Коваленко Л.В.	Коваленко, Л.В. Биохимические основы химии биологически активных веществ : учебное пособие / Л.В. Коваленко. – 5-е изд. – Москва : Лаборатория знаний, 2020. – 230 с. – ISBN 978-5-00101-860-5. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/4608.html	Учебное пособие	2020	ЭБС «IPRbooks»

8.2. Дополнительная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Аксенова Э.Н., Андрианова О.П., Арзамасцев А.П. и др.	Фармацевтическая химия : учебник / Э. Н. Аксенова, О. П. Андрианова, А. П. Арзамасцев [и др.] ; под редакцией Г. В. Раменской. – 3-е изд. – Москва : Лаборатория знаний, 2019. - 468 с. - ISBN 978-5-00101-647-2. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/88957.html	Учебник	2019	ЭБС «IPRbooks»
2	Шустова Е. А., Старикова А. А., Кутлалиева Э. Н.	Фармацевтическая химия. Часть 1: учебное пособие. – Изд. Астраханский государственный медицинский университет, 2022.-104 с.- ISBN 978-5-4424-0650-4.	Учебное пособие	2022	НЭБ РГБ

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
3	Шустова Е. А., Старикова А. А., Кутлалиева Э. Н.	Фармацевтическая химия. Часть 2: учебное пособие. – Изд. Астраханский государственный медицинский университет, 2022.-106 с. – ISBN 978-5-4424-0651-1.	Учебное пособие	2022	НЭБ РГБ
4	Степанов В.М. ред. Спирин А.С.	Степанов, В. М. Молекулярная биология. Структура и функция белков : учебник / В. М. Степанов ; под редакцией А. С. Спирин. Москва : Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2005. 336 с. ISBN 5-211-04971-3. Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. URL: http://www.iprbookshop.ru/13144.html	Учебник	2005	ЭБС «IPRbooks»
5	Мокрушин В.С., Вавилов Г.А.	Мокрушин, В.С. Основы химии и технологии биоорганических и синтетических лекарственных веществ : учебное пособие / В.С. Мокрушин, Г.А. Вавилов. – Санкт-Петербург : Проспект Науки, 2017. – 496 с. - ISBN 978-5-903090-23-5. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/79977.html	Учебное пособие	2017	ЭБС «IPRbooks»

8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

- WebofScience [Электронный ресурс]: мультидисциплинарная реферативная база данных. – Philadelphia: ClarivateAnalytics, 2016 – Режим доступа: apps.webofknowledge.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Scopus [Электронный ресурс]: реферативная база данных. – Netherlands: Elsevier, 2004 – Режим доступа: scopus.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Elibrary [Электронный ресурс]: научная электронная библиотека. – Москва: НЭБ, 2000. – Режим доступа: elibrary.ru. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- SpringerLink [Электронный ресурс]: [база данных]. – Switzerland: SpringerNature, 1842. – Режим доступа: link.springer.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ScienceDirect [Электронный ресурс]: коллекция электронных книг издательства Elsevier. – Netherlands: Elsevier, 2018. – Режим доступа: sciencedirect.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ЭБС «IPRbooks» (права принадлежат ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа»), договор № 620 от 15.06.2021 г. с 01.08.2021 по 01.08.2022 (по адресу <http://www.iprbookshop.ru>) - содержит учебники и учебные пособия, монографии, производственно-практические, справочные издания, а также деловую литературу для практикующих специалистов. В ЭБС включены издания за последние 5 лет по гуманитарным, социальным и экономическим наукам, по остальным отраслям знания - за последние 10 лет.

8.4. Перечень программного обеспечения

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

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

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А-215	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
2	НИЛ «Функциональные гетероциклические соединения» Лаборатория органической химии. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. А-203	Доска меловая, стол письменный, шкаф лабораторный для посуды, стеллаж металлический, мешалка магнитная ММ-5, колба нагретель ES-4110, электроплита, плитки электрические, сушильный шкаф ПЭ-4610, стол-мойка двойная 1200/600/850, поляриметр круговой СМ-3, рефрактометр ИРФ-454 Б-2м, рефрактометр RL3, штативы лабораторные ШЛБ, шкафы вытяжные, стол островной, стол приборный, мойка 60*80 SAFA левая, комплект моделей кристаллических решеток, компрессор, штатив для пипеток, табуреты лабораторные, химическая посуда
3	Лаборатория «Биохимии клетки и метаболизма» Учебная аудитория для проведения лабораторных работ А-209	Столы лабораторные, мойка 60*80 SAFA левая, стол приборный, шкаф вытяжной 1500 ШВ керамика, морозильная камера Binder, бокс микробиологической безопасности БМБ-II- "Ламинар-С."-1,5, тумба подкатная, сосуд Дьюара для длит. хранения СДС-35М, с 6 канистрами, блок внешний SRC 45 ZSPR-S Mitsubishi Heavy, блок внутренний SRK 45 ZSPR-S Mitsubishi Heavy, бокс для стерильных работ модель UVT-S (-AR) BS-040107-AAA, датчик O2 + плата управления (4-20мА) binder 5002-0060, источник питания PowerPac Basic, 100-120/220-240 V BioRad 1645050, камера Mini-Sub Cell GT, 7x7см, с заливочным столиком и упорами для заливки BioRad, микроцентрифуга лабораторная Epp MS MiniSpin, вариант приспособления MiniSpin, платформа BS-010108-EK P-12/100 12 мест д/колб 100-150мл для шейкера OS-20, OS-10, PSU-10i, ES-20, платформа BS-010116-BK P-16/88 для шейкера для пробирок диаметром 30мм, 88 мест (10мл, 15мл, 50 мл), платформа универсальная BS-010108-AK UP-12 с 3 ограничителями S-10, OS-20, PSU-10i, ES-20, термоциклер для амплификации нуклеиновых кислот T100, трансиллюминатор Квант-С, 20x20 см,

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
		длина волны 470 нм, холодильник POZIS RK - 103 A, шейкер термостатируемый ES-20 BS-010111-AAA (27 литров) без платформы, орбита 10 мм, BioSan, электропоратор MicroPulser Electroporator BioRad. термостат ТС-1/80 СПУ, стол письменный, табуреты лабораторные, химическая посуда.
4	Помещение для самостоятельной работы студентов. Г-401	Столы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет.