

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна»  
(СПбГУПТД)

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор, проректор по  
УР

\_\_\_\_\_ А.Е. Рудин

«\_04\_» \_\_\_\_ 04 \_\_\_\_ 2023 года

## Рабочая программа дисциплины

**Б1.В.08**

Методы органической и медицинской химии в оптимизации структурных прототипов лекарств

Учебный план: 2024-2025 04.05.01 ИПХЭ Медицинская химия ОО №3-1-155.plx

Кафедра: **44** Теоретической и прикладной химии

Направление подготовки:  
(специальность) 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: специализация "Медицинская химия"  
(специализация)

Уровень образования: специалитет

Форма обучения: очная

### План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа обучающихся			Сам. работа	Контроль, час.	Трудоём- кость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации	
	Лекции	Практ. занятия	Лаб. занятия					
8	УП	34	17	51	51	27	5	Экзамен
	РПД	34	17	51	51	27	5	
Итого	УП	34	17	51	51	27	5	
	РПД	34	17	51	51	27	5	

Санкт-Петербург  
2023

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утверждённым приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652

Составитель (и):

доктор химических наук, Профессор

\_\_\_\_\_

Зыкова Ирина Викторовна

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии

\_\_\_\_\_

Новоселов Николай  
Петрович

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_

Новоселов Николай  
Петрович

Методический отдел:

\_\_\_\_\_

## 1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

**1.1 Цель дисциплины:** формирование компетенций у студентов в области базовых принципов «конструирования» и синтеза аналогов соединений-лидеров в ходе дизайна структур лекарственных веществ

### 1.2 Задачи дисциплины:

рассказать о современных методах синтетической органической, неорганической и элементоорганической химии для получения физиологически активных соединений;

продемонстрировать основные концепции направленной структурной модификации соединения-лидера в зависимости от наличия информации о его молекулярной мишени действия в организме;

Научить выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью.

### 1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Медицинская химия

Коллоидная химия

Общая и неорганическая химия

Органическая химия

Высокомолекулярные соединения

Химия гетероциклических соединений

## 2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**ПК-7: Способен формировать новые направления научных исследований и опытно-конструкторских разработок в области химии, в том числе медицинской**

**Знать:** методы, использующие корреляционные уравнения, применяемые для исследования кинетики и механизма органических реакций, принципы и методы разработки лекарственных веществ с заданными свойствами

**Уметь:** планировать кинетические исследования и выбирать оптимальную схему их проведения

**Владеть:** навыками применения методов оптимизации методов структурных прототипов лекарств и содержательной интерпретации полученных результатов

## 3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа			СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)	Лаб. (часы)			
Раздел 1. Комбинаторный синтез аналогов соединения-лидера. Комбинаторные библиотеки и принципы их формирования	8						Ко
Тема 1. Комбинаторные библиотеки, принципы их формирования.		1			2		
Тема 2. Твердофазный параллельный синтез, его особенности, достоинства и недостатки. Примеры применения в аналоговом синтезе. Жидкофазный параллельный синтез, его особенности, достоинства и недостатки. Примеры применения в аналоговом синтезе. Практическое занятие: Изучение некоторых методов изостерической и биоизостерической модификации групп в структурах органических соединений. Лабораторная работа: Твердофазный параллельный синтез		3	2	8	7	ГД	

Раздел 2. Общие подходы к созданию аналогов соединения-лидера. Направленная модификация его структуры на основе эмпирической структурной аналогии						
Тема 3. Эмпирические правила биоизостерической замены. Классические и неклассические биоизостеры. Гомологические серии. Биологическая активность в гомологических сериях. Серии винилогов и этинологов. Винилология как ретранслятор химических свойств модифицируемых функциональных групп. Серии бензологов и азабензологов. Практическое занятие: Изучение различных способов синтеза гомологов, винилогов, бензологов, этинологов и азавинилогов. Лабораторная работа: Жидкофазный параллельный синтез	6	4	8	7		Ко
Тема 4. Трансформация колец. Циклические и «открытые» аналоги. Реорганизация циклических систем. Методы ограничения конформационной подвижности молекулы. Гидрофобный коллапс. Практическое занятие: Разработка синтетических схем для получения аналогов соединений-лидеров с различными типами конформационных ограничений в структуре. Лабораторная работа: Моноалкилирование.	4	2	8	7	ГД	
Раздел 3. Особые случаи создания аналогов соединения-лидера						Ко
Тема 5. Стратегии создания пептидомиметиков. Пролекарства и биопредшественники. Группировки-носители в пролекарствах и их направленная модификация. Практическое занятие: Рассмотрение подходов к синтезу аналогов соединений-лидеров с различными типами модификаций кольцевых систем. Лабораторная работа: Циклополиметилирование.	6	2	8	7		
Тема 6. Двойные лекарства и лекарства двойного действия и методы их дизайна. Практическое занятие: Рассмотрение подходов к синтезу различных структурных фрагментов пептидомиметиков. Лабораторная работа: Сдваивание биологически-активных центров – фармакофоров метиленовыми и открытыми полиметиленовыми цепочками	4	2	8	7	ГД	

Раздел 4. Стереохимические аспекты в дизайне лекарственных веществ						
Тема 7. Оптическая изомерия и физиологическая активность. Эудесмическое соотношение, правило Пфайффера. Практическое занятие: Изучение различных способов синтеза пролекарств. Разработка синтетических схем получения идентичных и неидентичных двойных лекарств. Лабораторная работа: Методы введения групп-винилогов.	4	2	8	7		Ко
Тема 8. Подходы, направленные на удаление хиральных центров в структурах лекарственных веществ. Практическое занятие: Изучение некоторых методов стереоселективного синтеза (на примере аналогов соединений- лидеров, содержащих хиральные центры). Лабораторная работа: Биоизостеры галогенов, карбокси-, гидроксигрупп	6	3	3	7	ГД	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)	34	17	51	51		
Консультации и промежуточная аттестация (Экзамен)	2,5			24,5		
<b>Всего контактная работа и СР по дисциплине</b>	104,5			75,5		

#### 4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

#### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

##### 5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

##### 5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ПК-7	Излагает основные кинетические закономерности и механизмы органических реакций, используемые при синтезе лекарственных препаратов Анализирует экспериментальные кинетические данные и предлагает оптимальные параметры химического синтеза Применяет методы оптимизации структурных прототипов лекарств	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания

##### 5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
5 (отлично)	Полный исчерпывающий ответ, показывающий понимание предмета. Обучающийся ориентируется в основных терминах, знаком с дополнительной литературой, правильно отвечает на дополнительные вопросы. Обучающийся показывает правильное понимание условия задачи, владеет навыками анализа условия, выбором решения, правильно пишет уравнения реакций.	

4 (хорошо)	<p>Стандартный ответ, лишенный индивидуальности. Обучающийся допускает незначительные погрешности при ответе на вопросы. Обучающийся показывает достаточное понимание условия задачи, владеет навыками анализа условия, путается в решении, правильно пишет уравнения реакций.</p> <p>Неполный ответ, имеют место небольшие пробелы в знаниях. Обучающийся допускает погрешности при ответе на вопросы. Обучающийся показывает достаточное понимание условия задачи, владеет навыками анализа условия, путается в решении, затрудняется написать уравнения реакций.</p>	
3 (удовлетворительно)	<p>Обучающийся показывает знания учебного материала в минимальном объеме. Допускает большое количество непринципиальных ошибок. Может устранить их с помощью преподавателя. Обучающийся показывает недостаточное понимание условия задачи, путается в решении.</p> <p>Неполный ответ, есть ошибки в изложении нескольких тем. Путается в терминах.</p> <p>Неполный ответ, есть ошибки в изложении нескольких тем. Путается в терминах.</p>	
2 (неудовлетворительно)	<p>Обучающийся не может ответить на вопрос без помощи экзаменатора. Многочисленные грубые ошибки. Обучающийся не понимает условие задачи, не может предложить варианты решения. Не знает свойства веществ. Не может написать уравнения реакций.</p> <p>Непонимание заданного вопроса Обучающийся не понимает условие задачи, не может предложить варианты решения. Не знает свойства веществ. Не может написать химические формулы.</p> <p>Попытка списывания, использования неразрешенных технических устройств или пользование подсказкой другого человека. Представление чужой работы, отказ от выполнения задания.</p>	

## 5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

### 5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 8	
1	Комбинаторные библиотеки, принципы их формирования.
2	Твердофазный параллельный синтез, его особенности, достоинства и недостатки. Примеры применения в аналоговом синтезе.
3	Жидкофазный параллельный синтез, его особенности, достоинства и недостатки. Примеры применения в аналоговом синтезе.

4	Эмпирические правила биоизостерической замены. Классические и неклассические биоизостеры.
5	Гомологические серии. Биологическая активность в гомологических сериях.
6	Серии винилогов и этинологов. Винилология как ретранслятор химических свойств модифицируемых функциональных групп.
7	Серии бензологов и азабензологов.
8	Трансформация колец. Циклические и «открытые» аналоги. Реорганизация циклических систем.
9	Методы ограничения конформационной подвижности молекулы.
10	Стратегии создания пептидомиметиков.
11	Пролекарства и биопредшественники. Группировки-носители в пролекарствах и их направленная модификация.
12	Двойные лекарства и лекарства двойного действия и методы их дизайна.
13	Оптическая изомерия и физиологическая активность. Эудесмическое соотношение, правило Пфайффера. Подходы, направленные на удаление хиральных центров в структурах лекарственных веществ.

### 5.2.2 Типовые тестовые задания

не предусмотрены

### 5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Изобразите структуру винилога,  
 Изобразите структуру азавинилога,  
 Изобразите структуру бензола для меперидина.  
 Изобразите структуру бензойной кислоты  
 Изобразите структуру муравьиного ангидрида  
 Изобразите структуру салициловой кислоты  
 Изобразите структуру аспаргината калия  
 Изобразите структуру эллаидиновой кислоты  
 Изобразите структуру стеариновой кислоты  
 Изобразите структуру антоциана  
 Изобразите структуру уротропина  
 Изобразите структуру бензоперена  
 Изобразите структуру фуксина  
 Изобразите структуру меркаптана

### 5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

#### 5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

#### 5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная  Письменная  Компьютерное тестирование  Иная

#### 5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

- Возможность пользоваться справочными таблицами, калькулятором;
- Время на подготовку ответа по билету 45 минут.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
<b>6.1.1 Основная учебная литература</b>				
Травень В. Ф.	Органическая Химия (Лаборатория знаний) : учебное пособие для вузов : в 3 т. Т. I. — 7-е изд., электрон. — (Учебник для высшей школы)	Москва: Лаборатория знаний	2020	<a href="https://ibooks.ru/reading.php?short=1&amp;productid=372723">https://ibooks.ru/reading.php?short=1&amp;productid=372723</a>
Травень В. Ф.	Органическая Химия (Лаборатория знаний) : учебное пособие для вузов : в 3 т. Т. III. — 7-е изд., электрон. — (Учебник для высшей школы)	Москва: Лаборатория знаний	2020	<a href="https://ibooks.ru/reading.php?short=1&amp;productid=372725">https://ibooks.ru/reading.php?short=1&amp;productid=372725</a>

Травень В. Ф.	Органическая Химия (Лаборатория знаний) : учебное пособие для вузов : в 3 т. Т. II. — 7-е изд., электрон. — (Учебник для высшей школы)	Москва: Лаборатория знаний	2020	<a href="https://ibooks.ru/reading.php?short=1&amp;productid=372724">https://ibooks.ru/reading.php?short=1&amp;productid=372724</a>
<b>6.1.2 Дополнительная учебная литература</b>				
Анисимова Н.А.	Химия гетероциклических соединений. Ч.1. Основы номенклатуры. Моногетероциклические соединения с одним гетероатомом	Санкт-Петербург: ВШТЭ СПбГУПТД	2017	<a href="http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=201912899">http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=201912899</a>

## 6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

1. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. URL:<http://window.edu.ru/>.
2. Электронно-библиотечная система IPRbooks: <http://www.iprbookshop.ru>
3. Электронная библиотека учебных изданий СПбГУПТД: <http://publish.sutd.ru>
4. Единый портал интернет тестирования в сфере образования [Электронный ресурс]. URL:<http://www.i-exam.ru/>.
5. Материалы Информационно-образовательной среды заочной формы обучения СПбГУПТД [Электронный ресурс]. URL:[http://sutd.ru/studentam/extramural\\_student/](http://sutd.ru/studentam/extramural_student/).

## 6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional  
Microsoft Windows

## 6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Занятия со студентами проводятся в специализированных помещениях кафедры - лекционных и учебных аудиториях: лаборатории, оборудованной специализированной мебелью, испытательным и измерительным оборудованием, компьютером.

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска