

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"

Кафедра фармакологии и фармации

Авторы-составители: **Лисовенко Наталья Юрьевна**

Рабочая программа дисциплины
MEDICINAL CHEMISTRY
Код УМК 93075

Утверждено
Протокол №6
от «23» марта 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Medicinal chemistry

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в Блок « С.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Специальность: **33.05.01** Фармация

направленность Программа широкого профиля (для иностранных граждан)

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Medicinal chemistry** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

33.05.01 Фармация (направленность : Программа широкого профиля (для иностранных граждан))

ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области

ОПК.2 владеть современными методами естественнонаучных исследований, анализа данных, проектирования

ПКВ.1 способность прогнозировать возможные механизмы биологического действия вещества на основании его химической структуры

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	33.05.01 Фармация (направленность: Программа широкого профиля (для иностранных граждан))
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	11
Объем дисциплины (з.е.)	4
Объем дисциплины (ак.час.)	144
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	56
Проведение лекционных занятий	14
Проведение практических занятий, семинаров	42
Самостоятельная работа (ак.час.)	88
Формы текущего контроля	Итоговое контрольное мероприятие (1) Письменное контрольное мероприятие (2)
Формы промежуточной аттестации	Экзамен (11 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

History of drugs

A brief history of medical chemistry. Place of discipline in a number of chemical Sciences and its close relationship with biochemistry, pharmaceutical chemistry, organic chemistry, physical and inorganic chemistry, analytical chemistry, and medical Sciences effects of biologically active substances on the human body.

Protein: structure and function

The primary structure of proteins. The secondary structure of proteins (The α -helix, The β -pleated sheet, The β -turn). The tertiary structure of proteins.

Covalent bonds—disulphide links. Ionic or electrostatic bonds. Hydrogen bonds. Van der Waals and hydrophobic interactions. Relative importance of bonding interactions. Role of the planar peptide bond. The quaternary structure of proteins. Translation and post-translational modifications. Proteomics. Protein function. Structural proteins. Transport proteins. Enzymes and receptors. Miscellaneous.

Enzymes: structure and function. Enzymes as drug targets.

Enzymes as catalysts. How do enzymes catalyse reactions? The active site of an enzyme. Substrate binding at an active site. The catalytic role of enzymes. Binding interactions. Acid/base catalysis. Nucleophilic groups. Cofactors. Naming and classification of enzymes. Genetic polymorphism and enzymes. Regulation of enzymes.

Isozymes. Enzyme kinetics.

Receptors: structure and function. Receptors as drug targets.

Role of the receptor. Neurotransmitters and hormones. Receptor types and subtypes. Receptor activation. How does the binding site change shape? Ion channel receptors (general principles, structure, gating, ligand-gated and voltage-gated ion channels).

G-protein-coupled receptors (general principles, structure, the rhodopsin-like family of G-protein-coupled receptors, dimerization of G-coupled receptors).

Kinase-linked receptors (general principles, structure of tyrosine kinase receptors). Activation mechanism for tyrosine kinase receptors (tyrosine kinase-linked receptors). Intracellular receptors. Regulation of receptor activity. Genetic polymorphism and receptors.

The design of agonists.

Binding groups (position of the binding groups, size and shape, other design strategies, pharmacodynamics and pharmacokinetics, examples of agonists, allosteric modulators). The design of antagonists (antagonists acting at the binding site, antagonists acting out with the binding site). Partial agonists. Inverse agonists. Desensitization and sensitization. Tolerance and dependence. Receptor types and subtypes. Affinity, efficacy, and potency.

Nucleic acids: structure and function. Nucleic acids as drug targets.

Structure of DNA (the primary structure of DNA, the secondary structure of DNA, the tertiary structure of DNA, chromatin, genetic polymorphism and personalized medicine). Ribonucleic acid and protein synthesis (Structure of RNA, transcription and translation, small nuclear RNA, genetic illnesses).

Intercalating drugs acting on DNA. Topoisomerase poisons: non-intercalating. Alkylating and metallating agents (nitrogen mustards, nitrosoureas, busulfan, cisplatin, dacarbazine and procarbazine, mitomycin C, antisense therapy).

Drug design: optimizing access to target.

Structure–activity relationships. Binding role of alcohols and phenols. Binding role of aromatic rings. Binding role of alkenes. The binding role of ketones and aldehydes. Binding role of amines. Binding role of amides. Binding role of quaternary ammonium salts. Binding role of carboxylic acids. Binding role of esters. Binding role of alkyl and aryl halides. Binding role of thiols and ethers. Binding role of other functional groups.

Binding role of alkyl groups and the carbon skeleton. Binding role of heterocycles. Isosteres. Testing procedures. SAR in drug optimization. Identification of a pharmacophore. Drug optimization: strategies in drug design (variation of substituents, extension of the structure, chain extension/contraction, ring expansion/contraction, ring variations, ring fusions, isosteres and bioisosteres, simplification of the structure, rigidification of the structure, conformational blockers, structure-based drug design and molecular modelling, drug design by NMR spectroscopy, the elements of luck and inspiration, designing drugs to interact with more than one target.

Computers in medicinal chemistry

Molecular and quantum mechanics (molecular mechanics, quantum mechanics, choice of method), Drawing chemical structures, three-dimensional structures, energy minimization, viewing 3D molecules, molecular dimensions, molecular properties (partial charges, molecular electrostatic potentials, molecular orbitals, spectroscopic transitions, the use of grids in measuring molecular properties). Conformational analysis (local and global energy minima, molecular dynamics, stepwise bond rotation Monte Carlo and the Metropolis method, genetic and evolutionary algorithms). Structure comparisons and overlays. Identifying the active conformation. (X-ray crystallography, comparison of rigid and non-rigid ligands, 3D pharmacophore identification, X-ray crystallography, structural comparison of active compounds, automatic identification of pharmacophores). Docking procedures (manual docking, automatic docking, defining the molecular surface of a binding site, rigid docking by shape complementarity, the use of grids in docking programs, rigid docking by matching hydrogen bonding groups, rigid docking of flexible ligands: the FLOG program, docking of flexible ligands: anchor and grow programs, docking of flexible ligands: simulated annealing and genetic algorithms). Automated screening of databases for lead compounds. Protein mapping (constructing a model protein: homology modelling, constructing a binding site: hypothetical pseudoreceptors). De novo drug design (General principles of de novo drug design, automated de novo drug design, planning compound libraries). Database handling.

Exam

Exam in the discipline Medical chemistry

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

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

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Musah Rabi A. Analysis of Drugs of Abuse. NY: Springer Science+Business Media, LLC, part of Springer Nature, 2018. Online ISBN 978-1-4939-8579-1. Текст электронный://
<https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4939-8579-1> <https://link.springer.com/book/10.1007/978-1-4939-8579-1>

Дополнительная:

1. Brown T. A. Biochemistry/Terence A. Brown.-Banbury:Scion Publishing,2017, ISBN 978-1-907904-28-8.- 522.-Библиогр. в конце глав. - Указ.: с. 509

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

При освоении дисциплины использование ресурсов сети Интернет не предусмотрено.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Medicinal chemistry** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

Presentation materials (slides on topics of lectures and practical classes);

on-line access to the Electronic library system (EBS)

access to the electronic information and educational environment of the University;

Internet services and electronic resources (search engines, e-mail, professional thematic chats and forums, audio and video conferencing systems, online encyclopedias, etc.).

List of required licensed and (or) freely distributed software :

1.The application allows you to view and play the media content of PDF files "Adobe Acrobat Reader DC".

2.Programs, video demonstrations (player) "Windows Media Player".

3.The program of browsing Internet content (a browser) "Google Chrome".

4.Office Suite of applications "LibreOffice"

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

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

1. Lecture classes-an Audience equipped with presentation equipment (projector, screen, computer / laptop) with appropriate software, chalk (s) or marker Board.

2. Seminar-type classes (seminars, practical classes) - an Audience equipped with presentation equipment (projector, screen, computer/laptop) with appropriate software, chalk (s) or marker Board.

3. Laboratory classes - laboratory of "Experimental pharmacology", equipped with specialized equipment. The composition of the equipment is defined in the Passport of the laboratory.

4. Group (individual) consultations-an Audience equipped with presentation equipment (projector, screen, computer / laptop) with appropriate software, chalk (s) or marker Board.

5. Current control-Audience equipped with presentation equipment (projector, screen, computer / laptop) with appropriate software, chalk (s) or marker Board.

6. Independent work-the Audience for independent work, equipped with computer equipment with the ability to connect to the Internet, provided with access to the electronic information and educational environment of the University. Premises of the Scientific library, Perm, Russia

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Medicinal chemistry**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции и
критерии их оценивания**

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ОПК.2 владеть современными методами естественнонаучных исследований, анализа данных, проектирования</p>	<p>Know the basics of possible mechanisms of action of biologically active molecules required in the formation of competencies. Be able to depict the chemical formulas of the most important representatives of Bioorganic molecules.</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Student does not know the basics of possible mechanisms of action of biologically active molecules required in the formation of competencies. Lack of skills to assess possible mechanisms of biological action of substances.interpret the results of pharmacological tests with the available data on the structure of biologically active compounds.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>The presence of General, unstructured knowledge about the basic modern views in the field of physiologically active molecules. Fragmentary application of methods for assessing the possible action of a physiologically active compound.</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>In General, formed, systemically organized knowledge about the basic modern views on the mechanism of action of biologically active molecules. No gross errors in understanding the material. In General, successful, with some minor shortcomings, the use of methods for assessing the mechanism of action of a substance on a particular target.</p> <p align="center">Отлично</p> <p>Formed, system-organized knowledge of the basic modern views in the field of biological targets and mechanisms of action of biologically active compounds.. Successfully and systematically applied target determination skills for biologically active compounds.</p>
<p>ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в</p>	<p>Knows of the modern directions of search for biologically active substances and methods of</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>The student has no idea about the modern directions of search for biologically active</p>

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>профессиональной области</p>	<p>establishing mechanisms of their impact on the living organism; Knows the main directions of obtaining and modifying the structure of the leading compound based on empirical structural analogy; the main provisions of pharmacokinetics and pharmacodynamics; the main mechanisms of action of the VAV receptors (acetylcholine, serotonin, glutamine, dopamine and adrenaline, histamine receptors); the main mechanisms of action of the VAV on nucleic acids; the main mechanisms of action ON enzymes; he is able to choose the right direction of search and implement it with the specific pharmacological task set before him; make a theoretical forecast on the creation of a biologically active compound based on the search results; correctly process and interpret the results of pharmacological tests with the available data on the structure of biologically active compounds.</p>	<p>Неудовлетворител substances and methods of establishing the mechanisms of their impact on the living organism. Not knows the main directions of obtaining and modifying the structure of the leading compound, does not know the basic provisions of pharmacokinetics and pharmacodynamics, the main mechanisms of action of the VAV on receptors (acetylcholine, serotonin, glutamine, dopamine and adrenaline, histamine receptors); the main mechanisms of action of the VAV on nucleic acids; the main mechanisms of action of the VAV on enzymes; Can not choose the right direction of the search and implement it with the specific pharmacological task set before him, as well as to make a theoretical forecast on the creation of a biologically active compound based on the results of the search. Unable correctly process and interpret the results of pharmacological tests with the available data on the structure of biologically active compounds.</p> <p>Удовлетворительн Student has General, unstructured data on modern directions of search for biologically active molecules. Has a fragmentary view of the receipt and modifications of the connection-leader. It is confused in the basic mechanisms of action of FAV on receptors, enzymes, nucleic acids. In General, successful processing and interpretation of the results of pharmacological tests with available data on the structure of biologically active compounds.</p> <p>Хорошо In General, formed, system-organized knowledge of modern directions of search for biologically active molecules. Has a fragmentary view of the receipt and modifications of the connection-leader. Understanding of the main mechanisms of action of FAV on receptors, enzymes, nucleic acids. It can correctly process and interpret the results of pharmacological tests with the available data on the structure of biologically active compounds.</p>

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Student has an idea of the modern directions of search for biologically active substances and methods of establishing mechanisms of their impact on the living organism; Knows the main directions of obtaining and modifying the structure of the leading compound based on empirical structural analogy; the main provisions of pharmacokinetics and pharmacodynamics; the main mechanisms of action of the VAV receptors (acetylcholine, serotonin, glutamine, dopamine and adrenaline, histamine receptors); the main mechanisms of action of the VAV on nucleic acids; the main mechanisms of action ON enzymes; he is able to choose the right direction of search and implement it with the specific pharmacological task set before him; make a theoretical forecast on the creation of a biologically active compound based on the search results; correctly process and interpret the results of pharmacological tests with the available data on the structure of biologically active compounds.</p>
<p>ПКВ.1 способность прогнозировать возможные механизмы биологического действия вещества на основании его химической структуры</p>	<p>Knows the main directions of obtaining and modifying the structure of the leading compound based on empirical structural analogy; the main provisions of pharmacokinetics and pharmacodynamics; the main mechanisms of action of the VAV receptors (acetylcholine, serotonin, glutamine, dopamine and adrenaline, histamine receptors); the main mechanisms of action of the VAV on nucleic acids; the main mechanisms of action ON enzyme.</p>	<p style="text-align: center;">Неудовлетворител</p> <p>The student has no idea about the modern directions of search for biologically active substances and methods of establishing the mechanisms of their impact on the living organism. Not knows the main directions of obtaining and modifying the structure of the leading compound, does not know the basic provisions of pharmacokinetics and pharmacodynamics, the main mechanisms of action of the VAV on receptors (acetylcholine, serotonin, glutamine, dopamine and adrenaline, histamine receptors); the main mechanisms of action of the VAV on nucleic acids; the main mechanisms of action of the VAV on enzymes; Can not choose the right direction of the search and implement it with the specific pharmacological task set before him, as well as to make a theoretical forecast on the creation of a biologically active compound based on the results of the search. Unable</p>

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Неудовлетворител</p> <p>correctly process and interpret the results of pharmacological tests with the available data on the structure of biologically active compounds.</p> <p style="text-align: center;">Удовлетворительн</p> <p>General, unstructured data on modern directions of search for biologically active molecules. Has a fragmentary view of the receipt and modifications of the connection-leader. It is confused in the basic mechanisms of action of FAV on receptors, enzymes, nucleic acids. In General, successful processing and interpretation of the results of pharmacological tests with available data on the structure of biologically active compounds.</p> <p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>In General, formed, system-organized knowledge of modern directions of search for biologically active molecules. Has a fragmentary view of the receipt and modifications of the connection-leader. Understanding of the main mechanisms of action of FAV on receptors, enzymes, nucleic acids. It can correctly process and interpret the results of pharmacological tests with the available data on the structure of biologically active compounds.</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Student has an idea of the modern directions of search for biologically active substances and methods of establishing mechanisms of their impact on the living organism; Knows the main directions of obtaining and modifying the structure of the leading compound based on empirical structural analogy; the main provisions of pharmacokinetics and pharmacodynamics; the main mechanisms of action of the VAV receptors (acetylcholine, serotonin, glutamine, dopamine and adrenaline, histamine receptors); the main mechanisms of action of the VAV on nucleic acids; the main mechanisms of action ON enzymes; he is able to choose the right direction of search and implement it with the specific pharmacological task set before him; make a theoretical forecast on the creation of a biologically active</p>

Компетенция	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		Отлично compound based on the search results; correctly process and interpret the results of pharmacological tests with the available data on the structure of biologically active compounds.

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Экзамен

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 50 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 50 балла

Компетенция	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ОПК.2 владеть современными методами естественнонаучных исследований, анализа данных, проектирования	Nucleic acids: structure and function. Nucleic acids a sdrug targets. Письменное контрольное мероприятие	Nucleic acids.
ПКВ.1 способность прогнозировать возможные механизмы биологического действия вещества на основании его химической структуры	Computers in medicinal chemistry Письменное контрольное мероприятие	Molecular and quantum mechanics (molecular mechanics, quantum mechanics, choice of method).
ОПК.1 знать основные теории, учения и концепции в профессиональной области	Exam Итоговое контрольное мероприятие	History of drugs. Protein: structure and function. Enzymes: structure and function. Enzymes as drug targets. Receptors: structure and function. Receptors as drug targets. Nucleic acids: structure and function. Nucleic acids a sdrug targets. Drug design: optimizing access to target. Computers in medicinal chemistry.

Спецификация мероприятий текущего контроля

Nucleic acids: structure and function. Nucleic acids a sdrug targets.

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Intercalating drugs acting on DNA. Topoisomerase poisons: non-intercalating.	10
Alkylating and metallating agents (nitrogen mustards, nitrosoureas, busulfan, cisplatin, dacarbazine and procarbazine, mitomycin C, antisense therapy).	10
Ribonucleic acid and protein synthesis (Structure of RNA, transcription and translation, small nuclear RNA, genetic illnesses).	5
Structure of DNA (the primary structure of DNA, the secondary structure of DNA, the tertiary structure of DNA, chromatins, genetic polymorphism and personalized medicine).	5

Computers in medicinal chemistry

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Automated screening of databases for lead compounds. Protein mapping (constructing a model protein: homology modelling, constructing a binding site: hypothetical pseudoreceptors). De novo drug design (General principles of de novo drug design, automated de novo drug design, planning compound libraries). Database handling.	10
Conformational analysis (local and global energy minima, molecular dynamics, stepwise bond rotation Monte Carlo and the Metropolis method, genetic and evolutionary algorithms).	10
Knows the main directions of obtaining and modifying the structure of the leading compound based on empirical structural analogy.	5
Docking procedures (manual docking, automatic docking, defining the molecular surface of a binding site, rigid docking by shape complementarity, the use of grids in docking programs, rigid docking by matching hydrogen bonding groups, rigid docking of flexible ligands: the FLOG program, docking of flexible ligands: anchor and grow programs, docking of flexible ligands: simulated annealing and genetic algorithms).	5

Exam

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **6 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**

Проходной балл: **20**

Показатели оценивания	Баллы
Knows the main directions of obtaining and modifying the structure of the leading compound based on empirical structural analogy;	10
Student is able to choose the right direction of search and implement it with the specific pharmacological task set before him; make a theoretical forecast on the creation of a biologically active compound based on the search results.	10
Knows the main mechanisms of action of the VAV on nucleic acids; the main mechanisms of action ON enzymes;	10
Know the main mechanisms of action of the VAV receptors (acetylcholine, serotonin, glutamine,	10

dopamine and adrenaline, histamine receptors).	