

Занятие 8

Тема занятия: Итоговая контрольная работа «Современные исследования в области дизайна лекарственных препаратов для лечения различных заболеваний»

Цель занятия: Изучить современные подходы к дизайну лекарственных веществ природного происхождения для моделирования их биологической активности.

Вопросы к занятию:

1. Этапы создания и лабораторный синтез потенциальных лекарственных препаратов.
2. Первичные этапы биотестирования и доклинические и клинические испытания.
3. Методы анализа органических соединений.
4. Категории чистоты вещества: определение температуры кипения и плавления.
5. Категории чистоты вещества: плотность, показатель преломления; молекулярная рефракция, удельное вращение.
6. Принципы химической модификации для моделирования их биологической активности.
7. Особенности химии ароматических соединений.
8. Создание групп синтетических лекарственных веществ случайными открытиями и аналоговыми синтезами на основе принципа химической модификации
9. Регрессионный анализ
10. Химические особенности гетероциклических соединений
11. Формирование протоарсенала природных лекарственных средств. Лекарственные средства растительного происхождения.
12. Формирование протоарсенала природных лекарственных средств. Лекарственные средства бактериального происхождения.
13. Комбинаторная химия.
14. Ввод химической структуры в программе HyperChem
15. Оптимизация геометрии в программе HyperChem
16. Основные понятия, современная химическая классификация алкалоидов.
17. Химические особенности алкалоидов: хинин.
18. Химические особенности алкалоидов: папаверин
19. Химические особенности алкалоидов: морфин, кодеин
20. Химические особенности алкалоидов: атропин, кокаин

- 21.Пролекарства. Эмпирические основы их дизайна. Фармакокинетические свойства лидерных молекул (показатели АРМЭТ)
- 22.Принцип антиметаболитов в умозрительном дизайне ЛП
- 23.Конформационный анализ в программе HyperChem
24. Особенности конформационного поиска
- 25.Определение активной группы в семействах биологически активных веществ. Принцип фармакофора. Умозрительный и эмпирический дизайн опиоидных анальгетиков на основе лидера-морфина
- 26.Химические особенности гликозидов.
- 27.Распознавание белковыми мишенями лекарственного вещества
- 28.Дизайн активного центра белка известной структуры
- 29.Дизайн активного центра белка неизвестной структуры по методу гомологии
- 30.Дизайн модели всего белка
- 31.Природные белокобразующие α -аминокислоты
- 32.Функциональная протеомика.
- 33.Строение, функции и активные центры ферментов
- 34.Белковые рецепторы-мишени. Строение и функции
35. Проблема резистентности к лекарственным веществам. Механизмы выработки резистентности к лекарствам
- 36.Некоторые химические и комбинированные приёмы борьбы с возникающей устойчивостью патогенных микроорганизмов к классическим лекарствам
- 37.Сравнительный анализ молекулярных полей (САМП)
- 38.Геномика. Постгеномный этап в создании новых лекарств. Дизайн потенциального лекарственного вещества, взаимодействующего с ДНК-мишенью.
- 39.Полимерные материалы для создания наноматрицы-носителя лекарственного агента. Их структуры и синтеза
- 40.Гомоцепные (карбоцепные) полимеры и сополимеры для создания лекарственных наночастиц.
- 41.Гетероцепные полимерные материалы
- 42.Нанотехнологии в дизайне устройств для защиты и доставки нанолечеств
- 43.Примеры успешного дизайна лечебных нанопрепаратов
- 44.Особенности работы в программе PASS