

## 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.Формированиеprotoарсенала природных лекарственных средств.  
Лекарственные средства растительного происхождения.
- 12.Формированиеprotoарсенала 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 мишениями 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  $\alpha$ -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 синтезы
- 40.Гомоцепные (карбоцепные) полимеры и сополимеры для создания лекарственных наноформ.
- 41.Гетероцепные полимерные материалы
- 42.Нанотехнологии в дизайне устройств для защиты и доставки нанолекарств
- 43.Примеры успешного дизайна лечебных нанопрепараторов
- 44.Особенности работы в программе PASS