

**УТВЕРЖДАЮ**  
Директор ИОС УрО РАН  
д.х.н. \_\_\_\_\_ Е.В. Вербицкий  
Приказ от 15.03.2022 г. № 26

**ОДОБРЕНО:**  
Ученым советом  
ИОС УрО РАН  
« 04 » марта 2022 г.  
Протокол № 3

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского  
Уральского отделения Российской академии наук  
(ИОС УрО РАН)

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины «**ФАРМАЦЕВТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ. ФАРМАКОГНОЗИЯ**»

образовательного компонента основной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности  
3.4.2. Фармацевтическая химия. Фармакогнозия

**Шифр и название области науки 3. Медицинские науки**

**Шифр и название группы научных специальностей 3.4. Фармацевтические науки**

**Шифр и название научной специальности 3.4.2. Фармацевтическая химия. Фармакогнозия**

**Отрасли науки, по которым присуждаются ученые степени Фармацевтические Биологические Химические**

**Форма обучения – Очная**

**Срок обучения – 3 года**

Екатеринбург 2022

Рабочая программа дисциплины «Фармацевтическая химия. Фармакогнозия» образовательного компонента основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре института по научной специальности 3.4.2. Фармацевтическая химия. Фармакогнозия.

### **АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ**

Программа предназначена для аспирантов, обучающихся по основной образовательной программе высшего образования – программе подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре в соответствии с федеральными государственными требованиями.

Рабочая программа:

- соответствует:

- паспорту научной специальности 3.4.2. Фармацевтическая химия. Фармакогнозия,
- базовому плану обучения по программе аспирантуры ИОС УрО РАН по научной специальности 3.4.2. Фармацевтическая химия. Фармакогнозия;

- подготовлена с учетом тематики научных исследований ИОС УрО РАН.

Дисциплина «Фармацевтическая химия. Фармакогнозия» относится к дисциплинам (модулям) образовательного компонента программы аспирантуры, является обязательной для освоения и направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по научной специальности.

Освоение дисциплины осуществляется на первом курсе обучения (1 - 2 семестры) со сдачей кандидатского экзамена на втором курсе (4 семестр) в соответствии с графиком учебного процесса.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е. (144 час.), в том числе:

- аудиторная работа - 1,5 з.е. (54 ч), представлена лекционными занятиями;
- самостоятельная деятельность аспиранта - 2,5 з.е. (90 ч).

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов системы углубленных профессиональных знаний в области стандартизации лекарственных препаратов с точки зрения эффективности и безопасности их применения, а также с учетом современных подходов к взаимосвязи - химический состав лекарственных препаратов и его фармакологическое действие.

Задача дисциплины - обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний по фармацевтической химии и фармакогнозии, методам стандартизации и контроля качества лекарственных средств на основе синтетического и растительного сырья для выполнения аспирантами научного компонента программы в части «Научная деятельность»: научно-исследовательская деятельность и подготовка диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

Систематизирование материала по дисциплине происходит в рамках четырех разделов:

- Фармацевтическая химия;
- Фармакогнозия;
- Теория методов исследования вещества в химии;
- Хемоинформатика.

Виды контроля:

- текущий – зачет (2 семестр);
- промежуточный - кандидатский экзамен (4 семестр);
- итоговый - в рамках представления подготовленной диссертации в виде научного доклада на заседании ученого совета института (8 семестр).

Программа разработана:

Глазыриной Л.Н., зав. отделом аспирантуры ИОС УрО РАН к.т.н., доц.

Хониной Т.Г., проф. отдела аспирантуры ИОС УрО РАН д.х.н.

Пестовым А.В., доц. отдела аспирантуры ИОС УрО РАН к.х.н., доц.

Ганебных И.Н., доц. отдела аспирантуры ИОС УрО РАН к.х.н.

## Содержание

1. Общая характеристика дисциплины	5
2. Содержание дисциплины	5
Фармацевтическая химия	
Фармакогнозия	
Теория методов исследования вещества в химии	
Хемоинформатика	
3. Фонд оценочных средств для контроля освоения дисциплины	11
4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	12
5. Материально – техническое обеспечение дисциплины	15

## 1. Общая характеристика дисциплины

### 2.1 Цели и задачи изучения дисциплины

**Цель изучения дисциплины** – формирование у аспирантов системы углубленных профессиональных знаний, навыков и умений в области стандартизации лекарственных препаратов (*далее - ЛП*) с точки зрения эффективности и безопасности их применения, а также с учетом современных подходов к взаимосвязи - химический состав лекарственных препаратов и его фармакологическое действие.

**Задача дисциплины** - обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний по фармацевтической химии и фармакогнозии, методам стандартизации и контроля качества лекарственных средств (*далее - ЛС*) на основе синтетического и растительного сырья.

### 1.2 Место дисциплины «Фармацевтическая химия. Фармакогнозия» в структуре программы аспирантуры

Дисциплина «Фармацевтическая химия. Фармакогнозия» относится к образовательному компоненту программы аспирантуры и является дисциплиной, обязательной для освоения.

Освоение дисциплины осуществляется на первом курсе (1-2 семестры) обучения в соответствии с графиком учебного процесса.

### 1.3 Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование у аспирантов способности:

- к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;
- к внедрению разработанных методов и методик, направленных на рациональное, эффективное и безопасное использование лекарственных средств;
- к организации и самостоятельному проведению научно - исследовательской работы с получением и последующим внедрением научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям в избранной области.

## 2. Содержание дисциплины

### 2.1 Трудоемкость освоения дисциплины

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.				
	Всего	По учебным семестрам			
		1	2	4	6
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>54/1.5</b>	<b>34/0.94</b>	<b>20/0.56</b>		
Лекции	54/1.5	34/0.94	20/0.56		
Практические занятия	-	-	-		
Лабораторные занятия	–	–	-		
<b>Самостоятельная работа студентов</b>	<b>90/2.5</b>	<b>60/1.67</b>	<b>30/0.83</b>		
<b>Вид контроля:</b>	-	-	-		
текущий	-	-	Зачет		
промежуточный	-	-	-	КЭ	
итоговый	-	–	-		ИА
<b>Общая трудоемкость по учебному плану</b>	<b>144/4.0</b>	<b>94/2.6</b>	<b>50/1.4</b>		

## 2.2 Разделы дисциплины, темы и виды занятий

№ п/п	Название раздела дисциплины, темы	Объем учебной нагрузки, час		
		Всего	Лекции	Самостоятельная работа
<b>1</b>	<b>Фармацевтическая химия</b>	<b>60</b>	<b>24</b>	<b>36</b>
1.1	Фармацевтическая химия как наука, ее проблемы и тенденции развития	6	2	4
1.2	Получение лекарственных средств	10	4	6
1.3	Стандартизация и контроль качества лекарственных средств	14	6	8
1.4	Метрологические основы фармацевтического анализа	10	4	6
1.5	Валидационная оценка методик анализа	10	4	6
1.6	Фармацевтическая химия и экология	10	4	6
	<b>Итого, час/з.е.</b>	<b>60/1.67</b>	<b>24/0.67</b>	<b>36/1.0</b>
<b>2</b>	<b>Фармакогнозия</b>	<b>34</b>	<b>12</b>	<b>22</b>
2.1	Основные проблемы фармакогнозии и тренды ее развития	6	2	4
2.2	Химический состав лекарственных растений, биологически - активные соединения природного происхождения	10	4	6
2.3	Пути биосинтеза биологически активных веществ в растениях и их метаболизм	6	2	4
2.4	Лекарственное растительное сырье как источник получения лекарственных средств	6	2	4
2.5	Разработка и утверждение нормативной документации на лекарственное растительное сырье и фитопрепараты	6	2	4
	<b>Итого, час/з.е.</b>	<b>34/0.94</b>	<b>12/0.33</b>	<b>22/0.61</b>
<b>3</b>	<b>Теория методов исследования вещества в химии</b>	<b>25/0.69</b>	<b>10/0.27</b>	<b>15/0.42</b>
<b>4</b>	<b>Хемоинформатика</b>	<b>25/0.69</b>	<b>10/0.27</b>	<b>15/0.42</b>
	<b>Всего, час/з.е.</b>	<b>144/4.0</b>	<b>54/1.5</b>	<b>90/2.5</b>

## 2.3 Содержание разделов курса

### 1. Фармацевтическая химия

*Фармацевтическая химия как наука, ее проблемы и тенденции развития.*

Фармацевтическая химия как наука. Объект фармацевтической химии. Методология фармацевтической химии. Задачи фармацевтической химии по созданию новых ЛС, разработке методов исследования и оценки качества лекарств, пути их решения. Место фармацевтической химии в комплексе фармацевтических наук.

Основные тенденции в создании новых ЛС.

*Получение лекарственных средств.*

Источники и методы получения ЛС: выделение из природного сырья;

воспроизведение физиологически активных природных веществ; синтез на основе метаболитов и антиметаболитов; биосинтез; использование генной инженерии; тонкий органический синтез.

Предпосылки для создания новых ЛС. Связь между структурой вещества и его биологической активностью как основа направленного поиска ЛС (роль биохимических факторов, использование данных по метаболизму и фармакокинетике). Химическая и биологическая трансформация лекарственных веществ (*далее - ЛВ*) и её значение для создания новых соединений. Компьютерное моделирование и прогнозирование биологической активности новых соединений.

Характеристика процессов тонкого органического синтеза химико-фармацевтических препаратов: типы химических реакций, условия их проведения (экстремальные и приближенные к естественному биосинтезу). Перспективы развития тонкого органического синтеза (поиск новых реакций и методов для создания новых и совершенствования действующих процессов; направленный синтез веществ с заданным комплексом биологических свойств). Возможности биотехнологии в получении лекарственных средств. Правила GMP.

Современное состояние синтеза лекарственных веществ и пути его дальнейшего развития.

#### *Стандартизация и контроль качества лекарственных средств.*

Стандартизация ЛС как организационно-техническая основа управления качеством продукции. Стандарты качества ЛС: ОФС', ФС, ФСП, НД, приказы МЗ РФ.

Декларирование качества ЛС. Законодательство РФ, регламентирующее обращение ЛС. Государственное регулирование контроля качества ЛС. Основные направления современной концепции обеспечения качества ЛС. Правила доклинических исследований безопасности и эффективности будущего ЛС. Надлежащая клиническая практика. Правила производства лекарств.

Методы испытания на чистоту. Возможные причины появления примесей, их природа и характер. Унификация и стандартизация испытаний. Способы количественной и полуколичественной оценки содержания примесей. Развитие требований в отношении испытаний на чистоту лекарственных средств.

Контроль качества лекарственных средств в процессе хранения. Изучение сроков годности лекарственных средств. Требования, предъявляемые к микробиологической чистоте готовых лекарственных препаратов, субстанций, вспомогательных материалов. Официальные испытания на стерильность.

#### *Метрологические основы фармацевтического анализа.*

Основы метрологии. Основные понятия. Метрологические характеристики результатов анализа. Роль и место метрологии и стандартизации в контроле качества лекарственных средств. Статистическая обработка результатов анализа в соответствии с требованиями ГФ. Типы аналитических приемов в фармацевтическом анализе и государственная система обеспечения единства и правильности измерений. Значение стандартных образцов лекарственных веществ для оценки качества лекарств.

#### *Валидационная оценка методик анализа.*

Современные требования к качеству лекарственных средств. Основные изменения и тенденции развития в требованиях, нормах и методах контроля при оценке качества. Комплексный характер оценки качества. Относительность требований, норм и методов исследования, пути совершенствования.

Общая характеристика испытаний на подлинность и чистоту и определения количественного содержания биологически активных веществ. Особенности фармацевтического анализа индивидуальных веществ и их лекарственных форм. Сравнительная оценка пригодности физических, физико-химических и химических методов, для исследования лекарственных средств по показателям: определение

физиологически активной части лекарственного средства, чувствительность, правильность, воспроизводимость.

Валидационная оценка методик анализа. Валидационные характеристики основных типов методик. Установление специфичности методик качественного и количественного анализа, определения посторонних примесей. Линейность. Прецизионность. Точность и правильность методик анализа. Предел обнаружения и количественного определения.

*Фармацевтическая химия и экология.*

Экологическая безопасность лекарственных средств, выявление и нормирование соединений антропогенного происхождения в лекарственном сырье, совершенствование и унификация методов их контроля. Создание экологически безопасных технологий, экологический контроль фармацевтических производств. Основные показатели загрязнения воздуха, почвы, воды. Основные типы загрязнителей. Химические превращения токсикантов в различных сферах, метаболизм и биоконцентрирование. Источники токсикантов. Классификация. Механизм действия.

## **2. Фармакогнозия**

*Основные проблемы фармакогнозии и тренды ее развития.*

Основные современные проблемы фармакогнозии. Задачи фармакогнозии на современном этапе ее развития по созданию новых лекарственных растительных средств, разработке методов стандартизации сырья и препаратов, с учетом возрастающих требований к эффективности и безопасности и рациональному использованию сырьевых и лекарственных ресурсов.

Основные понятия в фармакогнозии: лекарственное растение, лекарственное растительное сырье, сырье животного происхождения, биологически активное вещество, лекарственные растительные средства (ЛРС) и лекарственные средства животного происхождения (ЛСЖП) и т.д.

Методы исследования в фармакогнозии.

Определение запасов лекарственных растений на основе методик ресурсоведения дикорастущих растений различных мест обитания.

Определение подлинности (идентификация) и качества лекарственного растительного сырья, сырья животного происхождения и лекарственных средств с использованием современных биологических, химических и физико-химических методов анализа.

Методы выявления новых лекарственных растений. Изучение и использование опыта народной медицины. Массовое химическое исследование растений; химический скрининг и филогенетический принцип в выявлении лекарственных растений.

Основные направления научных исследований, проводимых по изучению лекарственных растений. Изучение запасов лекарственных растений.

Основные отечественные школы в области фармакогнозии, а также химии природных соединений.

*Химический состав лекарственных растений, биологически активные соединения природного происхождения.*

Системы классификаций лекарственных растений и лекарственного растительного сырья: химическая, морфологическая, ботаническая, фармакологическая и др.

Методы анализа лекарственного растительного сырья (биологические, химические, физико-химические). Применение хроматографических, структурных и спектральных методов для идентификации и количественного определения БАС в растительном сырье и препаратах.

Химический состав лекарственных растений. Действующие и сопутствующие вещества.



Физические, химические и химико-биологические свойства биологически активных соединений, относящихся к различным классам природных соединений. Выделение, разделение и очистка различных биологически активных соединений из растительного сырья. Установление строения и идентификация биологически активных природных соединений, выделенных из природного сырья (растительного и животного).

Проверка безопасности. Установление класса токсичности. Изучения спектра фармакологической активности.

*Пути биосинтеза биологически активных веществ в растениях и их метаболизм.*

Основные понятия о биологических процессах растительного организма. Первичные и вторичные метаболиты. Пути биосинтеза и метаболизма основных классов биологически активных веществ: алкалоидов, гликозидов, фенольных соединений, лигнанов, фитооэксидонов, терпеноидов, иридоидов, витаминов, стероидных соединений.

*Лекарственное растительное сырье как источник получения лекарственных средств.*

Получение лекарственных веществ природного происхождения, изучение безопасности и фармакологической активности. Сырьевая база лекарственных растений. Пути и методы переработки ЛРС.

Современное состояние сбора дикорастущих и культивируемых лекарственных растений. Нормативные документы, регламентирующие данный процесс, и пути их совершенствования. Правила приемки ЛРС и процесс отбора проб ЛРС (фасованного и ангро). Особенности проведения приемки различных видов ЛРС и особенности отбора аналитических проб. Назначение аналитических проб ЛРС и методов их оценки. Заключение по результатам установления соответствия требованиям анализируемого ЛРС соответствующей НД.

Импорт и экспорт лекарственного растительного сырья. Рациональное использование природных ресурсов лекарственных растений и их охрана (выявление зарослей, учет запасов, картирование; воспроизводство дикорастущих, лекарственных растений и др.). Культура клеток и тканей растений как перспективный источник получения лекарственного сырья.

*Разработка и утверждение нормативной документации на лекарственное растительное сырье и фитопрепараты.*

Основные направления научных исследований, проводимых по изучению лекарственных растений. Изучение запасов лекарственных растений. Стандартизация лекарственного растительного сырья. Разработка НД и рекомендаций по сбору, сушке, хранению сырья и др. Порядок разработки, согласования и утверждения НД на лекарственное растительное сырье: статьи ГФ, фармакопейные статьи (ФС), фармакопейные статьи предприятия (ФСП) и др. Структура фармакопейной статьи на лекарственное растительное сырье. Требования, предъявляемые к качеству лекарственного растительного сырья. Роль НД в повышении качества лекарственного сырья. Международные стандарты (СЕР, СГМР, СРР, ССР). Традиционные и современные инструментальные аналитические методы. Проблемы биоэквивалентности лекарственных веществ.

Государственная система разработки и утверждения нормативной и технологической документации. Сравнительная характеристика показателей, норм и методов по отечественной и зарубежной документации. Проблемы совершенствования имеющейся и создания новой нормативной документации.

### **3. Теория методов исследования вещества в химии**

*Электронное строение молекул. Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом*

Электронное строение двухатомных молекул (водорода, азота). Молекулярные орбитали. Теория ЛКАО. Связывающие, антисвязывающие, несвязывающие

молекулярные орбитали.  $\delta, \pi$ -орбитали. Гетероатомные полиатомные молекулы. Гибридизация и теория (метод). Электромагнитное излучение. Квантованность. Фотон. Энергия фотона. Спектр электромагнитного излучения и энергетические переходы вещества, связанные с его поглощением. Типы спектроскопии

#### *ИК- и КР-спектроскопия*

Колебательные переходы. Модель двухатомной молекулы как гармонического осциллятора. Закон Гука. Правила отбора для ИК-спектроскопии. Типы колебаний: валентные и деформационные. Симметричные и асимметричные колебания. Взаимодействие колебаний. Резонанс Ферми.

#### *УФ-спектроскопия*

Электронные переходы между молекулярными орбиталями. Теория кристаллического поля.

#### *Спектроскопия ЯМР*

Спин и магнитный момент ядра и его взаимодействие с внешним магнитным полем. Энергия ядер в магнитном поле. Экранирование ядер электронами. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность. Связь константы ССВ с геометрией молекулы. Расчет химических сдвигов ядер квантово-химическими методами.

#### *Спектроскопии для изучения твердого тела.*

Рентгенофазовый анализ. Рентгеноструктурный анализ. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия.

### **4. Хемоинформатика**

#### *Введение в хемоинформатику.*

История применения компьютерных технологий в химии и химической технологии. Предмет хемоинформатики. Работа с программными пакетами в разных операционных системах (Windows, Linux). Понятие о виртуализации и безопасности работы в Интернет. Обзор программного обеспечения химической направленности. Обзор ресурсов по хемоинформатике.

#### *Компьютерное представление химических структур и реакций.*

Принципы представления химических объектов в компьютерном виде. Линейные и табличные представления. Идентификаторы химических соединений. Распространённые форматы представления молекул: mol, sdf, rdf, cif, pdb, InChI. Структуры Маркуша. Алгоритмы канонизации структур на примере алгоритма Моргана. Молекулярные отпечатки (хэширование данных). Элементы теории графов. Матрицы смежности. Молекулярные поверхности и формы. Конвертация форматов данных. Визуализация данных.

#### *Химические базы данных.*

Принципы работы и классификация баз данных. Поиск в базах данных. Поисковые машины. Работа с графами, коэффициенты подобия и виды структурного поиска в химических базах данных. Создание и управление базами данных химических соединений. Обзор наиболее распространённых баз данных по химии.

#### *Молекулярные дескрипторы. Расчеты "структура–свойство".*

Типы молекулярных дескрипторов: элементарные, физико-химические, топологические, электронные, геометрические и химические дескрипторы. Понятие о методах машинного обучения. Основные методы и подходы анализа связи «структура–свойство» QSAR/QSPR. Построение и валидация моделей. Библиотеки структур. Обзор программного обеспечения и интернет-ресурсов по теме QSAR/QSPR. KNIME. Компьютерная оценка фармакологических эффектов (ADMET).

#### *Молекулярное моделирование.*

Молекулярное моделирование, докинг и виртуальный скрининг. Программный пакет AutoDock. Работа с химическими ресурсами института. Работа с кластером СКЦ

«Уран» в составе ЦКП ИММ УрО РАН. Информатика химических реакций. Компьютерные методы планирования химического синтеза.

*Табличные процессоры для решения задач хемоинформатики и хеометрики. Применение хемонинформатики в масс-спектрометрии.*

Обзор табличных процессоров (Microsoft Excel, Libre Office Calc, Google Таблицы). Предмет хеометрики. Метрология. Методы работы и веб-ресурсы. Программирование в VBA. Пакеты прикладных программ для математического анализа данных. Обзорные сведения по масс-спектрометрии. Масс-спектрометрические базы данных. Шкала Кендрика. Диаграмма Ван-Кревелена. Анализ больших данных. Метод главных компонент.

*Элементы биоинформатики.*

Предмет биоинформатики. Сравнение биоинформатики и хемоинформатики. Веб-ресурсы по биоинформатике. Анализ генетических последовательностей. Понятие о языке программирования Python.

*Понятие о проектировании в химии.*

Понятие химико-технологической системы (ХТС). Критерии инженерно-эколого-экономической эффективности производственных процессов и технологий. Анализ рисков. Программный пакет ChemCAD для моделирования и расчёта химических процессов.

**2.4 Практические (лабораторные) занятия – не предусмотрены.**

### **2.5 Самостоятельная работа**

Изучение учебного материала, перенесенного с аудиторных занятий на самостоятельную проработку.

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по следующим направлениям:

- библиография по проблемам фармацевтической химии, фармакогнозии, теории методов исследования вещества в химии и хемоинформатики;
- публикации (в том числе электронные) источников по фармацевтической химии, фармакогнозии, теории методов исследования вещества в химии и хемоинформатике;
- научно-исследовательская литература по актуальным проблемам фармацевтической химии, фармакогнозии, теории методов исследования вещества в химии и хемоинформатики.

Конспектирование и реферирование первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим разделам.

**2.6 Контрольные работы – не предусмотрены.**

**2.7 Список вопросов для промежуточного тестирования – не предусмотрен.**

**2.8 Тематика рефератов – не предусмотрена.**

**2.9 Активные методы обучения (деловые игры, научные проекты) - не предусмотрены.**

## **3. Фонд оценочных средств для проведения контроля освоения дисциплины**

**3.1 Текущий контроль -** в рамках собеседования по итогам освоения разделов рабочей программы дисциплины (зачет).

При текущем контроле применяется система «зачтено/не зачтено» с учетом критериев, представленных в таблице:

<b>Оценка</b>	<b>Критерии</b>
Зачтено	Аспирант показал творческое отношение к обучению, в совершенстве

	или в достаточной степени овладел знаниями, показал все (как минимум основные) требуемые умения и навыки
Не зачтено	Аспирант не владеет основными умениями и навыками

### 3.2 Промежуточный контроль - в виде экзамена кандидатского минимума.

С целью оценки уровня знаний на кандидатском экзамене используется пятибалльная система, с учетом критериев, отраженных в таблице:

Оценка (балл)	Критерии
Отлично	Аспирант показал творческое отношение к обучению, в совершенстве овладел всеми теоретическими вопросами дисциплины, показал все требуемые умения и навыки.
Хорошо	Аспирант овладел всеми теоретическими вопросами дисциплины, показал основные умения и навыки.
Удовлетворительно	Аспирант имеет недостаточно глубокие знания по теоретическим разделам дисциплины, показал не все основные умения и навыки.
Неудовлетворительно	Аспирант имеет пробелы по отдельным теоретическим разделам специальной дисциплины и не владеет основными умениями и навыками.

### 3.3 Итоговый контроль – в рамках итоговой аттестации.

Оценка уровня знаний при итоговом контроле осуществляется в соответствии с Положением об итоговой аттестации.

## 4. Учебно-методическое и информационное обеспечение

### 4.1 Основная литература

#### Фармацевтическая химия

1. Аляутдин Р.Н. Фармакология: учебник / Р.Н. Аляутдин, Т.А. Зацепилова, Б.К. Романов и др. – М.: Гэотар - Мед, 2009 г. - 390 с.
2. Беликов В.Г. Фармацевтическая химия: Учеб. пособие для студентов. - 3-е изд. - М.: МЕДпресс-информ, 2009. - 615с.
3. Государственная фармакопея Российской Федерации. XIII издание, вып. 1, 2 и 3 - М.: МЗ РФ, 2015.
4. Молчанов Г.И., Молчанов А.А., Кубалов Л.М. Фармацевтические технологии: Учеб. пособие по технологии лекарств для студентов фарм. факультета. Изд. 2-е. М.: Альфа-М, Инфра-М, 2011. - 336 с.
5. Прищеп Т.П., Чучалин В.С., Зайков К.Л. и др. Основы фармацевтической биотехнологии. Учеб. пособие. Ростов н/Д.: Феникс; Томск: Издательство НТЛ, 2006.
6. Сазыкин Ю.О., Орехов С.Н., Чакалева И.И. Биотехнология. Учебное пособие для студ. высш. учеб. заведений/под ред. А.В. Катлинского. - М.: Издательский центр «Академия», 2006. - 256 с.
7. Харкевич Д.А. Фармакология: учебник / Д.А. Харкевич. - 10-е изд., испр., перераб. и доп. - М.: ГЭОТАР - Медиа, 2008. - 752с.
8. Коваленко Л.И. Основы экологии и охраны природы: учебник для фарм. факультетов. Под ред. Арзамасцева А.П. М., 2008. - 416 с.

#### Фармакогнозия

1. Куркин, В.А. Фармакогнозия: Учебник для фарм. вузов (факультетов). 3е изд., перераб. и доп. - Самара: ООО «Офорт», ФГБОУ ВО СамГМУ Минздрава России, 2016. - 1279 с.

2. Муравьева Д.А., Самылина И.А., Яковлев Г.П. Фармакогнозия: Учебник. 4-е изд., перераб. и доп. - М.: ОАО «Издательство «Медицина», 2007. — 656 с.
3. Государственная фармакопея Российской Федерации. XIII издание, вып. 1, 2 и 3 - М.: МЗ РФ, 2015.
4. Киселева Т.Л., Смирнова Ю.А., Карпеев А.А. и др. Отечественные фармакопейные растения и сырье: учебное пособие. - М.: Издательство профессиональной ассоциации натуротерапевтов, 2010. - 108 с.
5. Энциклопедия лекарств. Регистр лекарственных средств России / гл. ред. Г.Л. Вышковский. - М.: Изд-во РЛС-Медиа, 2010. - Вып. 18. - 1296 с.

#### **Теория методов исследования вещества в химии**

1. Хаускрофт К., Констэбл Э. Современный курс общей химии. Т1. М.: Мир, 2002, 540 с.
2. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.- Бинوم. Лаборатория знаний. 2010. 496 с.
3. Драго, Р. С. Физические методы в химии: в 2 т. / Под ред. О. А. Реутова; Пер. с англ. А. А. Соловьянова. - М.: Мир, 1981. Т. 1. - 422 с.; Т. 2. - 456 с.
4. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. для ун-тов / Н. Ф. Степанов. - М.: Мир: Московский государственный университет, 2001. - 519 с.

#### **Хемоинформатика**

1. Введение в хемоинформатику. Серия учебных пособий (в 5 ч.). Т.И. Маджидов и др. – Казань, издательство Казанского университета, 2013-2017.  
 Часть 1. Компьютерное представление химических структур / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2013. - 174 с.  
 Часть 2. Химические базы данных / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2015. - 188 с.  
 Часть 3. Моделирование «структура-свойство» / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2015. - 304 с.  
 Часть 4. Методы машинного обучения / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2016. - 330 с.  
 Часть 5. Информатика химических реакций / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Изд. Казанского университета, 2017. – 244 с.
2. Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хельтье и др. / М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. - 318 с. - Пер. изд. : Molecular Modeling. Basic Principles and Applications. - Weinheim, 2008. - ISBN 978-5-9963-0156-0
3. A.R. Leach, V.L. Gillet. An Introduction to Chemoinformatics. Berlin: Springer, 2007. 250
4. Ramachandran, K. I. Computational Chemistry and Molecular Modeling. Principles and Applications: монография / K. I. Ramachandran, G. Deera, K. Namboori. - Berlin: Springer, 2008. - XXI, 397 p.: ил. - Библиогр. в конце глав. - Указ.: с. 391-397. - ISBN 978-3-540-77302-3: 3167.00 p.
5. Chemoinformatics. Advanced Control and Computational Techniques / ed. H. G. Gilani, K. G. Samper, R. K. Naghi. - New York: Apple Academic Press, 2013. - VIII, 204 p. - ISBN 978-1-926895-23-9.
6. Леск, А. Введение в биоинформатику/ - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 318 с. - Пер. изд.: Introduction to bioinformatics / A. M. Lesk. - Oxford, 2002. - ISBN 978-5-94774-501-6.

#### **4.2 Дополнительная литература**

##### **Фармацевтическая химия**

1. Анализ лекарственных смесей / А.П. Арзамасцев, В.М. Печенников, Г.М. Родионова и др. – М.: Компания Спутник+, 2000.
2. Беликов В.Г. Фармацевтическая химия. – М.: Высшая школа, 1993 г., в 2-х

частях.

3. Руководство к лабораторным занятиям по фармацевтической химии: Э.Н. Аксенова, О.П. Андрианова, А.П. Арзамасцев и др. – М.: Медицина, 2000.
4. Астахова А.В. Лекарства. Неблагоприятные побочные реакции и контроль безопасности / А.В. Астахова, В.К. Лепяхин - М.: Эксмо, 2008. - 255с.
5. Березин Б.Д., Березин Д.Б. Курс современной органической химии. – М.: Высшая школа, 2001.
6. Петров А.А., Бальян Х.В., Трощенко А.Т. Органическая химия. – С Пб: Иван Федоров, 2002.
7. Ким А.М. Органическая химия. – Новосибирск: Сиб. универ. изд-во, 2002.

#### **Фармакогнозия**

1. Коваленко Л.И., Родионова Т.М. Руководство к лабораторным занятиям по фармацевтической экологии. М., 2007. - 176 с.
2. Муравьева Д.А., Самылина И.А., Яковлев Г.П. Фармакогнозия – М.: Медицина, 2002.
5. Химический анализ лекарственных растений, под ред. Гринкевич Н.И., Сафронич Л.Н. - М.: Высшая школа, 1984.

#### **Теория методов исследования вещества в химии**

1. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.
2. Пентин, Ю. А. Физические методы исследования в химии: учеб. для вузов по спец. "Химия" / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков. - М.: Мир: АСТ, 2003. - 683 с.
3. Сергеев Н. М. ЯМР-спектроскопия: учеб. пособие для химиков-органиков / Н. М. Сергеев. - [М.] : Изд-во Моск. ун-та, 1981. - 278 с.
4. Герсон, Ф. Спектроскопия ЭПР высокого разрешения: переводное издание / Ф. Герсон; под ред. А. Л. Бучаченко; пер. с англ. Ю. Б. Гребенщикова. - М.: Мир, 1973. - 214 с.

#### **Хемоинформатика**

1. Tutorials in Chemoinformatics. / Ed. Alexandre Varnek - Wiley-VCH. 2017, 482 p. ISBN: 978-1-119-13796-2
2. J. Gasteiger, T. Engel. Chemoinformatics/ Berlin. Springer, 2003. 649 p.

#### **4.3 Программное обеспечение и интернет-ресурсы**

Программы пакета Microsoft Office

Электронные ресурсы Центральной научной библиотеки (ЦНБ) УрО РАН (30 точек доступа) - <http://cnb.uran.ru/>

Электронные ресурсы, доступные в рамках централизованной (национальной) подписки на научные информационные ресурсы <https://podpiska.rfbr.ru>

Доступ к полным текстам статей из журналов издательства "Эльзевир" на платформе ScienceDirect в 21 предметной коллекции (Freedom Collection): <https://www.elsevier.com/solutions/sciencedirect>

Научная электронная библиотека <http://elibrary.ru>

MEDLINE: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/>

MEDLINEplus <https://medlineplus.gov/>

EBSCO Publishing <https://www.ebsco.com/>

Научные журналы издательства Taylor & Francis (UK) на электронной платформе Informaworld: <https://taylorandfrancis.com/>

Полные тексты международных научных журналов World Scientific Publishing: <https://www.worldscientific.com/page/worldscinet>

Рефераты и полные тексты статей из журналов, книги, книжных серий, электронных ссылок научных издательств:

- Springer Verlag <https://link.springer.com/>

- Wiley <https://www.wiley.com/en-ie>

-POLYMERSnetBASE

<https://poly.chemnetbase.com/faces/polymers/PolymerSearch.xhtml>

- Chemical Abstracts <https://www.cas.org/>

- The Royal Society of Chemistry <https://pubs.rsc.org/>

- American Chemical Society <http://pubs.acs.org>

Базы ВИНИТИ (периодические издания, книги, фирменные издания, материалы конференций, тезисы, патенты, нормативные документы, депонированные научные работы) <http://www.viniti.ru/products/viniti-database>

Авторефераты диссертаций Dissertation Abstracts: <https://about.proquest.com/en/>

Электронные ресурсы в группе «Хемоинформатика и молекулярное моделирование» в социальной сети Вконтакте <https://vk.com/chemoinformatics>

Электронные ресурсы в каталоге гиперссылок официального сайта Института органического синтеза УрО РАН <https://www.ios.uran.ru/page/links>

## **5. Материально – техническое обеспечение дисциплины**

Институт располагает специально оборудованным помещением для проведения лекционных занятий.

В институте:

- создана локальная сеть, объединяющая 100 компьютеров, с выходом в Интернет;
- внедрена система корпоративной электронной почты на основе MS Exchange 2003, с возможностью удаленного доступа;
- предоставлены для пользования принтеры, сканеры и ксероксы, что способствует эффективной самостоятельной деятельности аспирантов при освоении дисциплины.

