

ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Кафедра Фармацевтичної хімії
(назва кафедри)

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри


(Володимир ГЕЛЬМБОЛЬДТ)
ПІБ

“ 27 “ серпня 2021 р.

МЕТОДИЧНА РОЗРОБКА ПРАКТИЧНОГО ЗАНЯТТЯ

Курс II рік підготовки докторів філософії Факультет Фармацевтичний

Навчальна дисципліна Фторидні компоненти засобів лікування та профілактики карієсу

(назва навчальної дисципліни)

Практичне заняття № 19 Тема: Спрямований пошук біологічно активних сполук за допомогою комп'ютерних технологій.

(назва теми)

Практичне заняття розробив:
Завідувач кафедри


(Володимир ГЕЛЬМБОЛЬДТ)

підпис

ПІБ

Практичне заняття обговорено на
методичній нараді кафедри
«27» серпня 2021 р.
Протокол № 1

Практичне заняття № 19

Тема: Спрямований пошук біологічно активних сполук за допомогою комп'ютерних технологій..

Мета: Узагальнити спрямований пошук сполук з біологічною активністю.

Основні поняття: QSAR; PASS-скрінінг; біологічна активність.

Обладнання: наочний матеріал, мультимедійний проектор.

Навчальний час: 2 години.

План

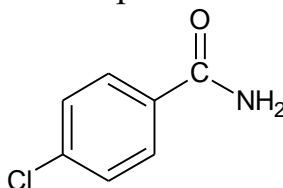
- I. Організаційний момент (привітання, перевірка присутніх, повідомлення теми, мети заняття, мотивація студентів щодо вивчення теми).
- II. Контроль опорних знань: (письмова робота, письмове тестування, фронтальне опитування тощо):
 - 2.1. Вимоги до теоретичної готовності студентів до виконання практичних занять.
Здобувач повинен:
 - Знати: фармакофорні групи, загальні класифікації лікарських засобів за фармакологічною активністю.
 - Вміти: користуватись комп'ютерними програмами.Дидактичні одиниці: підручник; банк тестових завдань.
 - 2.2. Питання (тестові завдання, задачі, клінічні ситуації) для перевірки базових знань за темою заняття:
 1. Введення у структуру фенольного гідроксилу надає наступну біоактивність:
 - A. Антисептичної;
 - B. Снодійної;
 - C. Транквілізуючої;
 - D. Протизапальної;
 - E. Протигельмінтозної.
 2. Введення у структуру карбоксамідної групи надає наступну біоактивність:
 - A. Снодійної;
 - B. Атисептичної;
 - C. Транквілізуючої;
 - D. Протизапальної;
 - E. Антигістамінної.
 3. Введення у структуру диарил (аміноалкіл)метанової групи надає наступну біоактивність:
 - A. Антигістамінної;
 - B. Снодійної;
 - C. Транквілізуючої;
 - D. Протизапальної
 - E. Антисептичної.

4. Розгалужені алкільні замісники у присутності атомів галогенів забезпечують:
 - A. Утруднення метаболізму;
 - B. Прискорення метаболізму;
 - C. Не впливають на метаболізм;
 - D. Прискорення гідролізу;
 - E. Прискорення окиснення.
5. Наявність н-алкільних ланцюгів забезпечують:
 - A. Підвищення ліпофільності;
 - B. Зниження ліпофільності;
 - C. Прискорення метаболізму;
 - D. Утруднення метаболізму;
 - E. Антисептичну дію.
6. Циклоалкільні групи покращують зв'язуваність з біорецептором за рахунок:
 - A. Ван-дер-Ваальсових сил;
 - B. Електростатики;
 - C. Dragon`s топологічного індексу;
 - D. Ліпофільності;
 - E. Донор/акцептор Н-зв'язків.
7. Етери та естери змінюють полярність молекул та впливають на біодоступність шляхом:
 - A. Уповільнення біодекарбоксілювання;
 - B. Уповільнення біоокиснення;
 - C. Прискорення біодекарбоксілювання;
 - D. Прискорення біоокиснення;
 - E. Уповільнення гідролізу.
8. Плоскі органічні кільця мають:
 - A. Однакому фармакологічну дію;
 - B. Гетероциклічні кільця мають більш виражену фармакологічну дію;
 - C. Різну фармакологічну дію;
 - D. Карбоциклічні кільця мають більш виражену фармакологічну дію;
 - E. Не мають впливу на структуру.
9. Введення у структуру атому бромі придає наступну біоактивність:
 - A. Седативну;
 - B. Транквілізуючу;
 - C. Прискорюють метаболізм;
 - D. Снодійну;
 - E. Протизапальну.
10. Введення у структуру ізопропілової групи придає наступну біоактивність:
 - A. Протизапальну;
 - B. Аналгетичну;

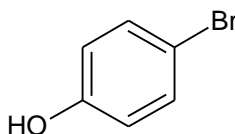
- С. Снодійну;
- Д. Антисептичну;
- Е. Антиангінальну.

III. Формування професійних вмінь, навичок:

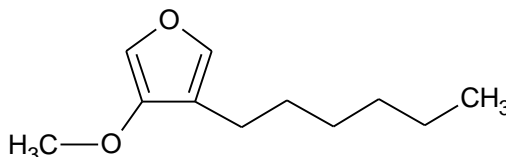
1.1. Задача 1 Знайти найбільш виражені біологічні активності:



Задача 2. Виходячи з структурної формули сформулювати фармакологічні ефекти:



Задача 3. Виходячи з структурної формули сформулювати фармакологічні ефекти:



1.2. Рекомендації (інструкції) щодо виконання завдань:

№/№	Основні завдання	Вказівки	Відповіді
1	2	3	4
1.	Фармакофор.	Перерахувати фармакофорні групи.	Фармацевтична хімія / П.О. Безуглий, В.А. Георгіянц, І.С. Гриценко, І.В. та ін.: за ред. П.О. Безуглого. – Вінниця: Нова книга, 2017. – 456 с.

1.3. Вимоги до результатів роботи, в т.ч. до оформлення: Індивідуальний бланк відповідей на тестові завдання (бланк додається).

IV. Підведення підсумків.

У результаті заняття здобувач ознайомився з спрямованим пошуком біологічно активних сполук за допомогою комп'ютерних технологій.

Список рекомендованої літератури

1. Державна Фармакопея України: в 3 т. / Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів».

- 2-е вид. — Харків: Державне підприємство «Український науковий фармакопейний центр якості лікарських засобів». — 2016.
2. Фармацевтична хімія / П.О. Безуглий, В.А. Георгіянц, І.С. Гриценко, І.В. та ін.: за ред. П.О. Безуглого. — Вінниця: Нова книга, 2017. — 456 с.
 3. Фармацевтичний аналіз: Навч. посіб. для студ. вищ. фармац. навч. закл. III-IV рівнів акредитації / П.О. Безуглий, В.О. Грудько, С.Г. Леонова та ін.; За ред. П.О. Безуглого. — Х.: Вид-во НФАУ; Золоті сторінки, 2001- 240 с.
 4. Лікарські засоби у стоматології: посібник / Л. Н. Максимовська, П. И. Рощина. — М.: Медицина, 2000. — 240 с.
 5. Гексафторосилікати з гетероциклічними катіонами: фізико-хімічні властивості та фармакологічна активність / В. О. Гельмбольдт, В. Є. Кузьмін, В. Ю. Анісімов, О. В. Продан // Одеський медичний журнал. — 2013. - №1. — С. 6-10
 6. Гельмольдт В. О. Розчинність у воді «онієвих» гексафторосилікатів з гетероциклічними катіонами — потенційних антикарієсних і біоцидних препаратів / В. О. Гельмбольдт, Л. В. Короєва // Одеський медичний журнал. — 2011. - № 6. — С. 11-13.
 7. Гельмбольдт В.О., Анісімов В.Ю. Амонієві гексафторосилікати: новий тип антикарієсних агентів // Фарм. журн. — 2018. — № 5-6. — С. 48-69.
 8. В.Ю. Анісімов, І.О. Шишкін, В.О. Гельмбольдт, А.П. Левицький. *Вісник фармації*. 2017, № 4(78), 75-83.
 9. Gelmboldt V.O., Anisimov V.Yu., Shyshkin I.O. et al. Synthesis, crystal structures, properties and caries prevention efficiency of 2-, 3-, 4-carboxymethylpyridinium hexafluorosilicates // J. Fluor. Chem. — 2018. — V. 205, № 1. — P. 15-21.
 10. Gelmboldt V.O., Anisimov V.Yu., Shyshkin I.O., Fonari M.S., Kravtsov V.Ch. Synthesis, structure, and anticaries activity of 2-amino-4,6-dihydroxypyrimidinium hexafluorosilicate // *Pharm. Chem. J.* — 2018. — V. 52, № 7. — P. 606-610. (*scopus*)
 11. Gelmboldt V.O., Shyshkin I.O., Fonari M.S., Kravtsov V.Ch. Synthesis, crystal structure and some properties of 4-hydroxymethylpyridinium hexafluorosilicate // J. Struct. Chem. — 2019. — V. 60, № 7. — P. 1150-1155. (*scopus*)
 12. Gelmboldt V.O., Shyshkin I.O., Anisimov V.Yu., Fonari M.S., Kravtsov V.Ch. *Bis*(3-hydroxymethylpyridinium) hexafluorosilicate monohydrate as a new potential anticaries agent: Synthesis, crystal structure and pharmacological properties // J. Fluorine Chem. — 2020. — V. 235. Article 109547. (*scopus*)
 13. Шишкін І.О., Анісімов В.Ю., Гельмбольдт В.О. Деякі властивості гексафторосилікатів 3,5-дизаміщених похідних 1,2,4-триазолу // *Фармацевтичний часопис*. — 2016. — № 4. — С. 21-23.
 14. Гельмбольдт В.О., Анісімов В.Ю., Шишкін І.О. Синтез октенідину гексафторосилікату — нового потенційного карієспрофілактичного і антибактеріального агента // *Фармацевтичний часопис*. — 2017. — № 3. — С. 13-16.

15. Шишкін І.О., Тимчишин О.Л., Гельмбольдт В.О. Гостра токсичність 4-карбоксиметилпіридинію гексафторосилікату // *Фарм. часопис.* – 2018. – № 3. – С. 80-84.
16. Приступа Б.В., Шишкін І.О., Рожковський Я.В., Гельмбольдт В.О. Оцінка протизапальної активності 2-, 3-, 4-карбоксиметилпіридинію гексафторосилікатів на каррагінановій моделі запалення // *Фарм. журнал.* – 2019. – № 4. – С. 82-87.
17. Продан О.В., Анісімов В.Ю., Кузьмін В.Є., Гельмбольдт В.О. Оцінка біологічної активності функціоналізованих піридинів і дипіридинів як потенційних компонентів карієспротекторних агентів // *Одеський мед. журн.* – 2015. – № 3 (149). – С. 25-29.
18. Effect of ammonium hexafluorosilicate application for arresting caries treatment on demineralized primary tooth enamel / Y. Hosoya, K. Tadokore, H. Otani [et al.] // *J. Oral Science.* – 2013. – Vol. 55, № 2. – P. 115–121.
19. Ammonium hexafluorosilicate elicits calcium phosphate precipitation and shows continuous dentin tubule occlusion/ T. Suge, A. Kawasaki, K. Ishikawa [et al.] // *Dent. Mater.* – 2008. – Vol. 24, № 2. – P. 192–198.
20. V.O. Gelmboldt, V.Ch. Kravtsov, M.S. Fonari. *J. Fluorine Chem.*, 2019, 221, 91-102.
21. T. Suge, A. Kawasaki, K. Ishikawa, T. Matsuo, S. Ebisu. *Dent. Mater.* 2010, 26, 29-34.
22. T. Suge, A. Kawasaki, K. Ishikawa, T. Matsuo, S. Ebisu. *Dent. Mater.* 2008, 24, 192-198.
23. Принципові підходи до оцінки співвідношення користь/ризик при виборі лікарського засобу / О.П. Вікторов, В.І. Мальцев, Ж.А. Хоменко [та ін.] // *Сучасні проблеми токсикології.* – 2006. – №2. – С. 21-28
24. Доклінічне дослідження лікарських засобів: метод. рекомендації / під. ред. чл-кор. АМН України А.В. Стефанова. – К.: Авіценна, 2002. – 567 с.
25. Аналітична хімія кремнію / Л. В. Мишляева, В. В. Краснощеков. – М.: Наука, 1972. – 212 с.