

Министерство образования и науки РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Самарский государственный университет»  
Химический факультет



**Утверждаю»**

Проректор по научной работе

*Handwritten signature of A.F. Krutov*

А.Ф. Крутов  
2011 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

### **Основы конструирования лекарственных препаратов и химической токсикологии**

ОД.А.06; цикл ОД.А.00 «Дисциплины по выбору аспиранта»  
основной образовательной программы подготовки аспиранта  
по отрасли 02.00.00 – Химические науки,  
специальность 02.00.03 – Органическая химия

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 02.00.03 – Органическая химия, в соответствии с Программой-минимумом кандидатского экзамена по специальности 02.00.03 «Органическая химия» по химическим наукам, утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ № 274 от 08.10.2007 г., и учебным планом СамГУ по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

Составители рабочей программы:

*Зарубин Юрий Павлович, ст. преподаватель, кандидат химических наук,*

*Белоусова Зоя Петровна, доцент, кандидат химических наук,*

*Пурыгин Петр Петрович, профессор, доктор химических наук*

Рабочая программа утверждена на заседании ученого совета химического факультета протокол № 1 от 08. 09. 2011 г.

Декан химического факультета

08. 09. 2011 г.



С.В. Курбатова

# 1. Цели и задачи дисциплины, ее место в системе подготовки аспиранта, требования к уровню освоения содержания дисциплины

## 1.1. Цели и задачи изучения дисциплины

### Цель дисциплины:

- изучение основ компьютерного моделирования и конструирования лекарственных препаратов, его классификаций, сфер применения;
- ознакомление с инструментальными программными средствами компьютерного моделирования и конструирования лекарственных препаратов;
- формирование у студентов знаний и умений, позволяющих проводить целенаправленный поиск молекулярных структур новых физиологически активных соединений с прогнозируемыми видами биологической активности.
- изучение основных понятий химической токсикологии;
- формирование у студентов знаний и умений, позволяющих устанавливать структуру и планировать синтезы различных классов соединений с заданными биологическими свойствами, прогнозировать их возможную биологическую (в том числе токсикологическую) активность.

### Задачи дисциплины:

- раскрыть роль компьютерного моделирования и конструирования лекарственных препаратов для поиска новых биологически активных веществ, его значимость для современной медицинской химии и фармакологии;
- рассмотреть основные типы и области применения инструментальных программных средств, используемых в компьютерном молекулярном моделировании и конструировании лекарственных препаратов;
- научить студентов основным приемам и методам компьютерного моделирования и конструирования с целью поиска новых лекарственных препаратов.
- рассмотреть основные механизмы действия токсичных веществ.
- научить пользоваться современными компьютерными программами, позволяющими оценить возможный токсический эффект соединения с точки зрения его структуры.

## 1.2. Требования к уровню подготовки аспиранта, завершившего изучение данной дисциплины

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

### иметь представление:

- 1) о роли компьютерного молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов, его классификациях, сферах применения;
- 2) об используемых в компьютерном молекулярном моделировании и конструировании лекарственных препаратов инструментальных программных средствах, их возможностях, сферах применения и ограничениях;
- 3) об основных принципах компьютерного молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов;
- 4) о классификациях токсичных веществ и методах их обезвреживания,
- 5) о биохимических превращениях токсичных веществ при участии живых организмов.

### знать:

- 1) об основных методологических подходах в компьютерном молекулярном моделировании и конструировании лекарственных препаратов;
- 2) об основных этапах компьютерного моделирования и конструирования лекарственных препаратов.
- 3) классификации токсичных веществ и методы их обезвреживания;
- 4) биохимические превращения токсичных веществ, происходящие при участии живых организмов;

- 5) основы действия наиболее распространенных токсикантов и основные пути их превращений *in vivo* и *in vitro*.

**уметь:**

- 1) работать с компьютерными программами, в которых реализованы расчетные методы компьютерного моделирования и конструирования лекарственных препаратов;
- 2) решать типичные задачи молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов с использованием прикладных программ;
- 3) проводить расчеты для определения физико-химических и возможных биологических свойств как известных, так и новых органических соединений с ранее неизвестной структурой;
- 4) продемонстрировать связь фундаментальных знаний органической химии с биологией;
- 5) определять ядовитые и сильнодействующие вещества в живых организмах и природных объектах;
- 6) проводить эксперименты по определению качества лекарственных препаратов.

### 1.3.Связь с предшествующими дисциплинами

Для усвоения курса «Компьютерное молекулярное моделирование и конструирование лекарственных препаратов» необходимо знать основы дисциплин «Информатика», «Численные методы и программирование», «Математические методы в химии», «Информатика в химии», «Квантовая механика и квантовая химия», «Компьютерная химия», «Органическая химия», «Биология с основами экологии» в объеме программы высшего профессионального образования.

Аспирант должен владеть основами работы на компьютере в операционных системах семейства Windows, в программных пакетах Microsoft Office, OpenOffice, Accelrys Discovery Studio Client, ACD/Labs, ISIS/Draw, Avogadro, Arguslab, OpenBabel, Jmol, PC GAMESS, MacMolPlt онлайнные службы сайта <http://www.rcsb.org/> и программы PASS Inet.

### 1.4.Связь с последующими дисциплинами

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данного курса, необходимы при подготовке и написании диссертации по специальности 02.00.03 – Органическая химия.

## 2. Содержание дисциплины

### 2.1. Объем дисциплины и виды учебной работы (в часах и зачетных единицах)

Форма обучения (вид отчетности)

3 год аспирантуры; вид отчетности – зачет.

Вид учебной работы	Объем часов / зачетных единиц
<b>Трудоемкость изучения дисциплины</b>	36 / 1
<b>Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)</b>	4
в том числе:	
лекции	2
практические занятия	2
лабораторные занятия	-
<b>Самостоятельная работа аспиранта (всего)</b>	32

в том числе:	
Подготовка к практическим занятиям	4
Подготовка реферата	0
Подготовка эссе	0
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	28

## 2.2. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц			
		лекции	лабораторные работы	практические занятия	самостоят. работа
1	Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов и его значимость для решения задач токсикологии	2	0	2	2
2	Компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск	0	0	0	2
3	Получение и использование трехмерных фармакофоров	0	0	0	2
4	Молекулярный докинг	0	0	0	2
5	Молекулярные дескрипторы	0	0	0	2
6	Структурно-основанное проектирование лигандов de novo	0	0	0	2
7	Количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR)	0	0	0	2
8	Корреляция «структура–токсический эффект»	0	0	0	2
9	Идентификация токсичных соединений	0	0	0	2
10	Классификация ядовитых и сильнодействующих веществ по характеру их действия на млекопитающих	0	0	0	2
11	Методы определения токсичных веществ в различных средах	0	0	0	2
12	Избирательная токсичность	0	0	0	2

13	<b>Превращение веществ в водной среде и накопление их элементами экосистем</b>	0	0	0	2
14	<b>Действие чужеродных веществ на живые организмы</b>	0	0	0	2
	<i>Итого:</i>	2	0	2	28

### 2.3. Лекционный курс

#### **Тема 1. Введение. Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов и его значимость для решения задач токсикологии**

Определение макромолекулы и лиганда. Типы лекарственных препаратов: агонисты, антагонисты, обратные агонисты. Основные требования к лекарственному препарату. «Хитовые» молекулы и «лидерные» серии. Высокопроизводительный скрининг. Основные проблемы поиска новых лекарственных средств и необходимость использования вычислительных методов. Используемые пакеты компьютерных программ. Основные понятия химической токсикологии. Объекты химико-токсикологического анализа. Типы классификаций токсичных веществ.

#### **Тема 2. Компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск**

Базы данных химических соединений. Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций). Основы двумерного субструктурного поиска. Используемые пакеты компьютерных программ.

#### **Тема 3. Получение и использование трехмерных фармакофоров**

Преимущества трехмерных баз данных перед двухмерными. Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомолекул. Определение трехмерного фармакофора и биоизостерных групп. Картография фармакофора. Проблемы расчета трехмерных фармакофоров. Включение дополнительных геометрических особенностей в трехмерный фармакофор. Источники данных для трехмерных баз данных. Фармакофорные ключи. Используемые пакеты компьютерных программ.

#### **Тема 4. Молекулярный докинг**

Сущность молекулярного докинга. Основные проблемы в молекулярном докинге. Функции выигрыша в молекулярном докинге, используемые алгоритмы оптимизации. Программы для поиска в трехмерных базах данных и докинга. Используемые пакеты компьютерных программ.

#### **Тема 5. Молекулярные дескрипторы**

Молекулярное подобие и поиск подобия. Типы молекулярных дескрипторов. Коэффициенты распределения: физический смысл и методы расчета, используемые программы. Молярная рефракция: формулы для расчета и используемые программы. Топологические индексы и их разновидности. Фармакофорные ключи как молекулярные дескрипторы. Используемые пакеты компьютерных программ.

#### **Тема 6. Структурно-основанное проектирование лигандов *de novo***

Расположение благоприятных позиций молекулярных фрагментов в пределах участка связывания. Соединение молекулярных фрагментов в участке связывания. Методы структурно-основанного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы ВИЧ-1. Используемые пакеты компьютерных программ.

## **Тема 7. Количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR)**

Отбор соединений для QSAR-анализа. Получение QSAR-уравнений. Перекрестная проверка правильности. Интерпретация QSAR-уравнений. Используемые пакеты компьютерных программ.

## **Тема 8. Корреляция «структура-токсический эффект»**

Основные параметры токсического эффекта. Доза, время действия. Парадоксальный эффект. Уравнение Габера, Лэнгмюра, Фрейндлиха, Мейера. Пороговая концентрация, пороговая время. Кривые “доза-эффект”, “время-эффект”. Летальные концентрации.

Особенности биологического действия органических веществ. Теория наркоза Мейера и Овертона. Совместное действие токсических веществ: понятие синергизма, индекс токсичности (ИТС). Кумуляция и ее оценка: материальная и функциональная. Адаптация живых организмов к токсическим воздействиям: генотипическая и фенотипическая.

Прогнозирование эффекта. Прогнозирование токсического действия галогенопроизводных органических соединений в зависимости от их структуры. Корреляция «структура-токсичность» в ряду соединений, проявляющих кожно-нарывное действие. Три основных фактора, определяющих возможность проявления избирательной токсичности биологически-активным веществом.

## **Тема 9. Идентификация токсичных соединений**

Физико-химические методы. Определение ядовитых и сильнодействующих веществ спектральными, электрохимическими, хроматографическими и биохимическими методами анализа.

Обнаружение ядовитых и сильнодействующих веществ, перегоняемых с водяным паром и их изолирование из анализируемых объектов подкисленным спиртом и подкисленной водой.

Синильная кислота и ее производные. Ядовитые галогенпроизводные. Альдегиды и кетоны. Спирты. Карбоновые кислоты.

Салициловая кислота. Барбитуровая кислота и ее производные. Фенацетин. Алкалоиды.

## **Тема 10. Классификация ядовитых и сильнодействующих веществ по характеру их действия на млекопитающих**

Классификация по химическим признакам и по токсикологическим свойствам.

Лакримогенное действие галогензамещенных органических соединений (монохлорметиловый эфир хлоругольной кислоты, дихлорангидрид угольной кислоты, метиловый эфир монохлоругольной кислоты, дифосген, хлорпикрин). Кожно-нарывные отравляющие вещества: структура, биологическая активность и механизм действия (иприт, люизит).

## **Тема 11. Методы определения токсичных веществ в различных средах**

Перегонка с водяным паром. Экстракция органическими растворителями из кислого раствора. Экстракция органическими растворителями из щелочного раствора.

Обнаружение веществ, экстрагируемых дистилляцией с водяным паром: синильная кислота, галогенпроизводные на примере хлороформа и четыреххлористого углерода, альдегиды и кетоны на примере формальдегида и ацетона, спирты на примере метилового, этилового и амилового спиртов, уксусной кислоты, нитробензола, анилина, фенола и крезола.

Обнаружение веществ, экстрагируемых из биологического материала хлороформом из кислого раствора на примере салициловой кислоты, а также барбитуровой кислоты и ее производных.

Обнаружение веществ, экстрагируемых хлороформом из щелочного раствора на примере алкалоидов, производных пиримидина.

## **Тема 12. Избирательная токсичность**

Основные и прикладные задачи водной токсикологии. Источники поступления токсичных веществ в водную среду; естественные и антропогенные. Загрязнение первичное и вторичное. Основные методы водной токсикологии: биотестирование и биоиндикация.

Избирательная токсичность. Лекарственные вещества, используемые в медицине; агонисты, антагонисты и вещества, применяемые для заместительной терапии. Пищевые продукты и токсич-

ность. Пищевая аллергия. Использование токсичных веществ для борьбы с вредными видами живых организмов.

### **Тема 13. Превращение веществ в водной среде и накопление их элементами экосистем.**

Основные процессы, происходящие в водной среде. Физические, химические, биологические и геологические. Металлы и их формы в водной среде. Органические соединения и их превращения в водной среде.

Способы поступления веществ в организм. Уравнение скорости диффузии. Коэффициент накопления. Коэффициент дискриминации. Коэффициент накопления по пищевой цепи.

Превращения токсичных веществ при участии живых организмов. Метилирование на примере ртути и мышьяка. Стадии превращения органических веществ: метаболическое, конъюгация, летальный синтез. Окисление концевых алифатических групп, десульфирование и окисление серы, дегалогенирование, восстановление нитро- и азосоединений, присоединение гидроксильных групп.

### **Тема 14. Действие чужеродных веществ на живые организмы**

Стадии действия токсикантов. Начальные процессы действия токсикантов; токсикант - рецептор как пример фермент-субстратного взаимодействия. Истинный порог действия вещества. Понятие о тиоловых ядах. Классификация ядов по общему характеру действия; специфические и неспецифические. Особенности действия специфических ядов; физическая токсичность (наркотический эффект). Липидная теория клеточной депрессии. Классификация ядов по характеру действия на млекопитающих: яды локального действия, ферментные. Протоплазматические, гемолитические, нервно-паралитические, наркотические.

Влияние на метаболизм. Гемоглобин, миоглобин. Структура глобина и гема, их функции в живом организме. Оксигемоглобин, карбоксигемоглобин, метгемоглобин. Тканевая гипоксия. Влияние токсичных веществ на ферменты. Ингибиторы и активаторы ферментативных реакций. Механизмы ингибирования ферментативных реакций на примере действия различных токсикантов: действие на цитохромоксидазу, ацетилхолинэстеразу, моноэтаноламинооксидазу цианидов, органических соединений, сероуглерода, боевых отравляющих веществ, сульфаниламидных препаратов, пестицидов. Влияние токсикантов на структуру клеточных мембран (нарушение осморегуляции и анемия). Влияние температуры, параметров среды на токсический эффект.

Отдаленные эффекты действия токсичных веществ. Понятие о мутагенах и мутациях. Мутации соматические и генетические: нарушения функциональные и морфологические. Совместное действие токсических веществ: понятие синергизма, индекс токсичности (ИТС). Кумуляция и ее оценка: материальная и функциональная. Адаптация живых организмов к токсическим воздействиям: генотипическая и фенотипическая.

**2.4. Практические занятия** – «Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов и его значимость для решения задач токсикологии» (2 часа).

## **3. Организация текущего и промежуточного контроля знаний**

**3.1. Контрольные работы** – не предусмотрены.

**3.2. Список вопросов для промежуточного тестирования** – не предусмотрено.

**3.3. Самостоятельная работа**

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

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

- молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов и его значимость для решения задач токсикологии;
- компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск;



- получение и использование трехмерных фармакофоров;
- молекулярный докинг;
- молекулярные дескрипторы;
- структурно-основанное проектирование лигандов *de novo*;
- количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR);
- корреляция «структура-токсический эффект»;
- идентификация токсичных соединений;
- классификация ядовитых и сильнодействующих веществ по характеру их действия на млекопитающих;
- методы определения токсичных веществ в различных средах;
- избирательная токсичность;
- превращение веществ в водной среде и накопление их элементами экосистем;
- действие чужеродных веществ на живые организмы.

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

### 3.3.1. Поддержка самостоятельной работы:

- Список литературы и источников для обязательного прочтения.
  - Полнотекстовые базы данных и ресурсы, доступ к которым обеспечен из кампусной сети СамГУ (сайт научной библиотеки СамГУ, URL: <http://weblib.samsu.ru/level23.html>):
1. Издания Самарского государственного университета (<http://weblib.samsu.ru/level23.html#13>)
  2. Полнотекстовая БД диссертаций РГБ (<http://weblib.samsu.ru/level23.html#14>)
  3. БД реферативного журнала «Химия» (<http://weblib.samsu.ru/level23.html#15>)
  4. Научная электронная библиотека РФФИ (e-Library) (<http://weblib.samsu.ru/level23.html#18>)
  5. БД издательства ELSEVIER (<http://weblib.samsu.ru/level23.html#22>)
  6. Oxford University Press (<http://weblib.samsu.ru/level23.html#27>)
  7. Университетская библиотека ONLINE (<http://weblib.samsu.ru/level23.html#28>)
  8. Университетская информационная система России (<http://weblib.samsu.ru/level23.html#29>)

### 3.3.2. Тематика рефератов – не предусмотрены.

**Итоговый контроль** проводится в виде зачета.

**4. Технические средства обучения и контроля, использование ЭВМ** (*Перечень обучающих, контролирующих и расчетных программ, диафильмов, слайдфильмов, кино- и телефильмов*).

Программные пакеты: Microsoft Office; OpenOffice; Accelrys Discovery Studio Client, PASS Inet, ACD/Labs; ISIS/Draw; Avogadro; Arguslab; PC GAMESS, OpenBabel; Jmol; MacMolPlt онлайн-сервисы сайта <http://www.rcsb.org/>

Сайт «Дистанционные образовательные технологии» Самарского государственного университета (Химический факультет) – URL: <http://dls.ssu.samara.ru/moodle/course/index.php>

Сайт научной библиотеки СамГУ, с доступом к электронному каталогу и полнотекстовым базам данных – URL: <http://weblib.samsu.ru/level23.html>

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

## 6. Материальное обеспечение дисциплины (Современные приборы, установки (стенды), необходимость специализированных лабораторий и классов)

Компьютерные классы, оснащенные компьютерами класса Pentium 4 с выходом в Интернет и в локальную сеть Самарского государственного университета, а также принтеры, сканеры и ксероксы.

## 7. Литература

### 7.1. Основная

1. Leach A.R. and Gillet V.J. An introduction to chemoinformatics. Revised Edition. 2007. Springer.
2. Young D.C. Computational drug design. 2009. John Wiley & Sons, Inc.
3. Comprehensive Medicinal Chemistry II. Volume 4: Computer-Assisted Drug Design. Editors-in-Chief: Taylor J.B. and D.J. Triggle. Elsevier, 2006.
4. Токсикологическая химия: учебник для вузов / под ред. Т.В. Плетеневой. – 2-е изд., испр. – М.: ГЭОТАР – Медиа, 2006. – 512 с.
5. Срок годности пищевых продуктов: Расчет и испытание: Пер. с англ. / Под ред. Р. Стеле – СПб.: Профессия, 2008 - 480 с.

### 7.2. Дополнительная

1. Leach A.R. Molecular modeling: principles and applications. 2nd edition. 2001. Pearson Education Limited.
2. Seydel J.K., Wiese M. Drug-membrane interactions: analysis, drug distribution, modeling. 2002. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
3. Стюпер Э. Машинный анализ связи химической структуры и биологической активности. М.: Мир, 1986.
4. Раевский О.А. // Рос. хим. журн. 1995. № 39. С. 109–120.
5. Раевский О.А. // Успехи химии. 1999. Т. 68. № 6. С. 555–575.
6. Раевский О.А. // Успехи химии. 1988. Т. LVII. № 9. С. 1565–1585.
7. Раевский О.А., Авидон В.В., Новиков В.П. //Хим.-фарм. журнал. 1982. Т. 16. С. 968–971.
8. Раевский О.А., Новиков В.П. // Хим.-фарм. журнал. 1982. Т. 16. С. 583–586.
9. Набавич В.М., Дмитриков В.П. // Успехи химии. 1993. Т. 62. Вып. 1. С. 27–39.
10. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефирова Н.С. // Успехи химии. 1988. Т. 57. Вып. 3. С. 337–365.
11. Круглов В.В., Борисов В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика. М.: Горячая линия — Телеком, 2001.
12. Poroikov V., Filimonov D. 2001. Computer-aided prediction of biological activity spectra. Application for finding and optimization of new leads // *Rational Approaches to Drug Design*, Eds. H.-D. Holtje, W.Sipl, Prous Science. Barcelona. P.403–407.
13. Поройков В.В., Филимонов Д.А. 2001. Компьютерный прогноз биологической активности химических соединений как основа для поиска и оптимизации базовых структур новых лекарственных // Азотистые гетероциклы и алкалоиды. М.: Иридиум-пресс. Т. 1. С. 123–129.
14. Поройков В.В. Компьютерное предсказание биологической активности веществ: пределы возможного. Химия в России. 1999. № 2. С. 8–12.
15. Глоризова Т.А., Филимонов Д.А., Лагунин А.А., Поройков В.В. Тестирование компьютерной системы для предсказания биологической активности PASS на выборке новых химических соединений. Хим.-фарм. журнал. 1998. 32 (12). С. 32–39.
16. Овчинников Ю.А. Биоорганическая химия. М.: Мир, 1987.

### 7.3. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины для организации самостоятельной работы аспирантов

1. <http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/games/PCGAMES%207.1.C/> (все файлы)
2. [http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/Accelrys\\_DS\\_Client\\_3.1/DS31Client.exe](http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/Accelrys_DS_Client_3.1/DS31Client.exe)
3. [http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/ACDLabs\\_12\\_free/chemsk12.exe](http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/ACDLabs_12_free/chemsk12.exe)

4. <http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/Avogadro/avogadro-1.0.3-win32.exe>
5. [http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/Arguslab\\_4.0.1/setup.exe](http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/Arguslab_4.0.1/setup.exe)
6. [http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/OpenBabel\\_2.3.0/OpenBabel2.3.0a\\_Windows\\_Installer.exe](http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/OpenBabel_2.3.0/OpenBabel2.3.0a_Windows_Installer.exe)
7. [http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/jmol\\_11.8.26/](http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/jmol_11.8.26/) (все файлы)
8. <http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/OpenEye-2010/distributives/> (все файлы)
9. <http://www.uni-smr.ac.ru/archive/win/science/chem/OpenEye-2010/databases/> (все файлы)

1. Пурыгин П.П., Белоусова З.П. «Основы химической токсикологии» Учебное пособие. Изд-во «Самарский университет». Самара. 2004 (гриф УМО по химии).

2. Белоусова З.П. Пищевые токсиканты. Учебное пособие. Изд-во «Самарский университет». Самара. 2005 (гриф УМО по химии).

3. Белоусова З.П., Пурыгин П.П. «Основы химической токсикологии» Учебное пособие. Изд-во «Самарский университет». Самара. 2004 (гриф УМО по химии).

4. Белоусова З.П., Пурыгин П.П. «Основы химической токсикологии» Лабораторный практикум. Изд-во «Самарский университет». Самара. 2007.

5. [http://chemfac.ssu.samara.ru/metod\\_lit.htm](http://chemfac.ssu.samara.ru/metod_lit.htm)

6. Учебно-методическое пособие по основам конструирования лекарственных препаратов (в разработке).

Учебно-методические материалы на сайте кафедры органической, биоорганической и медицинской химии ([http://chemfac.samsu.ru/KOChem/ucheb\\_pos.htm](http://chemfac.samsu.ru/KOChem/ucheb_pos.htm)):

- Справочник химика, III том  
[http://chemfac.samsu.ru/KOChem/OX\\_doc/nikolskij\\_02\\_03.djvu](http://chemfac.samsu.ru/KOChem/OX_doc/nikolskij_02_03.djvu)

Прикладные программы:

- Accelrys Discovery Studio Client, PASS Inet, ACD/Labs; ISIS/Draw; Avogadro; Arguslab; PC GAMESS, OpenBabel; Jmol; MacMolPlt Accelrys Discovery Studio Client, PASS Inet, ACD/Labs; ISIS/Draw; Avogadro; Arguslab; PC GAMESS, OpenBabel; Jmol; MacMolPlt для визуализации, молекулярно-механических и квантовохимических расчетов.