

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ  
ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ФГБОУ ВО «ЛГПУ»)

Факультет естественных наук

Кафедра химии и биохимии

УТВЕРЖДАЮ  
Врио декана факультета  
естественных наук  
М.В. Воронов  
« 16 » декабря 2023 г.



**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Моделирование лекарственных препаратов

По направлению подготовки – 04.03.01 Химия

Профиль подготовки – Медицинская и фармацевтическая химия.

Квалификация выпускника – бакалавр

Форма обучения очная

Курс 4, семестр 7

Луганск, 2023

Рабочая программа учебной дисциплины «Моделирование лекарственных препаратов» является частью основной профессиональной образовательной программы для подготовки бакалавров по направлению подготовки 04.03.01 Химия и профилю Медицинская и фармацевтическая химия очной формы обучения.

Рабочая программа учебной дисциплины разработана в соответствии с ФГОС ВО – бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденным приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 17 июля 2017 г. № 671 (с изменениями и дополнениями), Профессиональным стандартом, утвержденным Приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации «Об утверждении профессионального стандарта» от 18 октября 2013 г. № 544н (с изменениями и дополнениями), Профессиональным стандартом, утвержденным Приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации «Об утверждении профессионального стандарта» от 22 мая 2017 г. № 431н и Профессиональным стандартом, утвержденным Приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации «Об утверждении профессионального стандарта» от 22 мая 2017 г. № 432н.

#### СОСТАВИТЕЛИ:

доцент кафедры химии и биохимии ФГБОУ ВО «ЛГПУ», кандидат химических наук, доцент  
Сараева Татьяна Александровна  
ассистент кафедры химии и биохимии ФГБОУ ВО «ЛГПУ» Барышев Богдан Николаевич

Утверждена на заседании кафедры химии и биохимии

Протокол от «07» декабря 2023 г. № 6

Заведующий кафедрой химии и биохимии

 В.Д. Дяченко

Одобрена на заседании учебно-методической комиссии факультета естественных наук

Протокол от «16» декабря 2023 г., протокол № 6.

Председатель учебно-методической комиссии  
факультета естественных наук

 С.Н. Несторенко

#### СОГЛАСОВАНО:

Заведующий учебно-методическим отделом

 В.В. Савенков

## **1. Цели и задачи дисциплины.**

### ***Цель изучения дисциплины:***

– подготовка студентов к научно-исследовательской деятельности, связанной с созданием лекарственных препаратов в академических институтах и промышленных предприятиях с использованием средств хемо- и биоинформатики, молекулярного моделирования.

– обучение навыкам моделирования активности лекарственных перпреатов на базе современных методов вычислительной химии (QSAR, докинг, и т.д.)

### ***Задачи:***

– сформировать представления о том, каким образом происходит дизайн лекарственных препаратов, какие идеи лежат в основе технологии создания новых препаратов

– актуализировать требования к современным лекарственным препаратам, познакомить с теоретическими подходами к созданию новых лекарственных препаратов, показать типичный алгоритм виртуального скрининга при создании лекарственных препаратов.

## **2. Место дисциплины в структуре ОПОП.**

Дисциплина «Моделирование лекарственных препаратов» входит в часть, формируемую участниками образовательных отношений, блока дисциплин подготовки студентов по направлению подготовки 04.03.01 Химия, профиль подготовки «Медицинская и фармацевтическая химия» очной формы обучения.

Необходимыми условиями для освоения дисциплины являются

### ***знания:***

– об основных классах органических соединений;

– понимание принципов, на которых базируется взаимодействие функциональных групп внутри молекулы между собой, а также межмолекулярные взаимодействия вида «группа-рецептор»;

### ***умения:***

– логического мышления, классификации и систематизации данных, способности к самостоятельной работе и работе с литературой;

### ***навыки:***

– саморефлексии, способствующие осмыслению целей и задач своей профессиональной подготовки, успешному проектированию своего профессионального будущего;

Содержание дисциплины является логическим продолжением содержания дисциплин обязательной части и создает предпосылки для глубокого освоения химических наук, методики преподавания химии в средних учебных заведениях, основ промышленного производства лекарственных препаратов.

## **3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций**

Код по ФГОС ВО	Индикатор достижения	Результаты обучения по дисц.
Общепрофессиональные		
ОПК-3 – способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	<p>ОПК-3.1 – Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности</p> <p>ОПК-3.2 – Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности</p>	<p><b>Знает:</b> об основных классах органических соединений; понимает природу взаимодействия функциональных групп внутри молекулы, а также межмолекулярные взаимодействия вида «группа-рецептор»;</p> <p>осведомлён об основных техниках и подходах к молекулярному моделированию;</p> <p><b>Умеет:</b> логически мыслить, классифицировать и систематизировать данные; способен к самостоятельной работе и работе с литературой;</p> <p><b>Владеет навыками:</b> саморефлексии, способствующими осмыслению целей и задач своей профессиональной подготовки, методами молекулярного моделирования биополимеров и лекарственных веществ, навыками фармакофорного поиска, основными методами 3D-QSAR и программными средствами прогнозирования биологической активности, навыками создания лекарственных средств.</p>

#### 4. Структура и содержание дисциплины

##### 4.1. Объем учебной дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Объем часов (зач. ед.)
	ОФО
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>180</b> <b>(5 зач.ед.)</b>
<b>Обязательная аудиторная нагрузка (всего часов), в том числе:</b>	<b>80</b>
Лекции	30
Семинарские занятия	50
Практические занятия	
Лабораторные работы	
Курсовая работа (курсовой проект)	
Другие формы и методы организации учебного процесса	
<b>Самостоятельная работа студента (всего)</b>	<b>73</b>
Форма аттестации	Экзамен

## 4.2. Содержание разделов дисциплины

Тема 1. Введение в дисциплину.

Тема 2. Алгоритм создания лекарственного препарата

Тема 3. Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов

Тема 4. Алгоритм виртуального скрининга химических соединений

Тема 5. Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы.

Тема 6. Метод докинга.

Тема 7. Использование обратного QSAR для создания соединений

## 4.3. Лекции

№ п/п	Название темы	Объём часов
		ОФО
1	Предмет курса. Основные понятия, используемые при создании лекарственного препарата. Основные этапы разработки, испытания и внедрения лекарственного препарата. Требования к лекарствам. Типичные причины отклонения лекарственных препаратов на различных этапах разработки и испытаний.	2
2	Алгоритм создания лекарственного препарата. Практические и теоретические создание лекарственных препаратов.	4
3	Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов. Основы метода. Основные понятия и подходы. Использование библиотек соединений. Основы комбинаторной химии.	4
4	Алгоритм виртуального скрининга химических соединений. Типичные фильтры: "лекарствоподобия", "лидероподобия", структурные фильтры, фармакофорные фильтры. Многообразие фильтров. Виртуальный скрининг, основанный на структуре лигандов. Скрининг, основанных на схожести. Использование SAR/QSAR. Фармакофорный поиск с использованием структуры лиганда. Способы определения фармакофора.	6
5	Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы. Основные подходы, используемые при таком типе скрининга. Трёхмерные фармакофоры и их использование для скрининга.	4

	Фармакофорный поиск с использованием структуры. Способы формулирования фармакофора. Основные программы и подходы, используемые для виртуального скрининга с использованием фармакофоров.	
6	Метод докинга. Основные алгоритмические подходы, используемые для докинга. Скоринг. Типы скоринг функций. Наиболее популярные программы докинга.	4
7	Использование обратного QSAR для создания соединений. De novo дизайн лекарственных препаратов. Основные методы de novo дизайна. Использование биоизостеризма химических групп для создания лекарственных препаратов. Основные биоизостерные группы. Алгоритмы биоизостерного замещения. Программы, используемые для создания лекарственных препаратов с использованием биоизостерного замещения.	6
<b>Итого:</b>		<b>30</b>

#### 4.4. Практические занятия

№ п/п	Название темы	Объем часов
		ОФО
1	Проблемно-ориентированная дискуссия по мировому опыту создания лекарственных препаратов	4
2	Дизайн сфокусированных и диверсифицированных библиотек химических соединений	8
3	Формирование библиотек химических соединений для виртуального скрининга с использованием типичных фильтров «лекарствоподобия», «лидероподобия», QSAR-моделей.	8
4	Проведение виртуального скрининга химических соединений с использованием фармакофорного поиска, основанного на структуре биомолекулы и лиганда.	20
5	Проведение докинга: подготовка биомишени, валидация метода (редокинг и кросс-докинг), виртуальный скрининг.	10
<b>Итого:</b>		<b>50</b>

#### 4.5. Лабораторные работы – не предусмотрены

#### 4.6. Самостоятельная работа студентов

№ п/п	Название темы	Вид СРС	Объем часов
			ОФО
1	Алгоритм создания лекарственного препарата	Конспект-схема	18
2	Высокопроизводительный скрининг и его использование	Подготовка к контрольной работе	18

	в создании лекарственных препаратов		
3	Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы.	Подготовка домашнего задания	18
4	Метод докинга.	Подготовка домашнего задания	19
<b>Итого:</b>			<b>73</b>

#### **4.7. Курсовые работы не предусмотрены.**

### **5. Образовательные технологии**

Преподавание дисциплины "Моделирование лекарственных препаратов" сопровождается:

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- использованием интернет-ресурсов и интернет-баз данных для поиска информации о лекарственных препаратах, а также данных для создания моделей,
- обучение использованию классических программ для молекулярного моделирования,
- в качестве финального задания студенты должны выполнить небольшое самостоятельное исследование по заданному преподавателем направлению, подготовить доклад, выступить перед другими студентами, принять участие в обсуждении.

### **6. Формы контроля освоения дисциплины.**

Текущая аттестация студентов производится в дискретные временные интервалы лектором и преподавателем, ведущим практические занятия по дисциплине в следующих формах:

- тестирование;
- письменные задания;
- контрольные работы;

Промежуточный контроль по результатам освоения дисциплины проходит в форме устного или письменного зачета (включает в себя ответ на теоретические вопросы и выполнение практической работы и индивидуальных заданий)

Система оценивания учебных достижений студентов, оценочные средства представлены в фонде оценочных средств к рабочей программе учебной дисциплины (в приложении)

### **7. Учебно-методическое и программно-информационное обеспечение дисциплины**

#### **а) основная литература:**

1. Фармацевтическая технология. Изготовление лекарственных препаратов : учебник / А. С. Гаврилов. - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2010. - 624 с.

2. Вайнштейн В. А., Каухова И. Е. Двухфазная экстракция в получении лекарственных и косметических средств. – СПб: Проспект Науки, 2010. – 104 с.

3. Фармацевтическая технология. Технология лекарственных форм: учебник / И. И. Краснюк, Г. В. Михайлова, Т. В. Денисова, В. И. Складенко; под ред. И. И. Краснюка, Г. В. Михайловой. - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2011. - 656 с.

***б) дополнительная литература:***

1. Галкина И. В. Основы химии биологически активных веществ: учебное пособие для вузов - Химия. Казань Казанский государственный университет, 2009. 151 с.

2. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров: [сборник]/под ред. Иванова В. А. Москва URSS [ЛИБРОКОМ, 2009. 662 с.

3. Молекулярное моделирование: теория и практика/ Х.-Д. Хельтье и др; под ред. В. А. Палюлина и Е. В. Радченко; пер. с англ. - М: Бином. Лаборатория знаний, 2009.-318 с.

***в) интернет-ресурсы***

Online chemical modeling environment - <http://ochem.eu/home/show.do>

Virtual Computational Chemistry Laboratory - <http://www.vcclab.org>

База данных PDB - <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

База данных ZINC - <http://zinc.docking.org/>

Драг-дизайн: как в современном мире создаются новые лекарства - <http://biomolecula.ru/content/15>

Лекарственные средства - <http://www.buymedicine.ru/karta-sayta/>

**8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Лекционные занятия – аудитория, оснащенная доской. Лабораторные занятия – аудитории кафедры химии и биохимии (2-456; 2-457; 2-461; 2-463; 2-464), оснащенные доской, химическими реактивами, лабораторной посудой и оборудованием, мойками, вытяжками, таблицами и др.