

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

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

Факультет естественных наук

Кафедра химии и биохимии

УТВЕРЖДАЮ

Врио декана факультета  
естественных наук

М.В. Воронцов

« 26.06.2023 » 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

Рабочая программа учебной дисциплины «Моделирование лекарственных препаратов» является частью основной профессиональной образовательной программы для подготовки бакалавров по направлению подготовки 04.03.01 Химия и профиль «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 «ЛПТУ», кандидат химических наук, доцент  
Сараева Татьяна Александровна  
ассистент кафедры химии и биохимии ФГБОУ ВО «ЛПТУ» Барышев Богдан Николаевич

Утверждена на заседании кафедры химии и биохимии

Протокол от «03» января 2023 г. № 6

Заведующий кафедрой химии и биохимии

 В.Д. Дяченко

Одобрена на заседании учебно-методической комиссии факультета естественных наук

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

Председатель учебно-методической комиссии  
факультета естественных наук

 С.П. Песторенко

#### 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»; 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>Владет 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
Общая трудоемкость дисциплины	180 (5 зач.ед.)
Обязательная аудиторная нагрузка (всего часов), в том числе:	110
Лекции	40
Семинарские занятия	-
Практические занятия	40
Лабораторные работы	30
Курсовая работа (курсовой проект)	-

Другие формы и методы организации учебного процесса	
<b>Самостоятельная работа студента (всего)</b>	<b>43</b>
<b>Контроль</b>	<b>27</b>
Форма аттестации	Экзамен

## **4.2. Содержание разделов дисциплины**

### **Тема 1. Введение в дисциплину.**

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.

### **Тема 2. Алгоритм создания лекарственного препарата**

Практические и теоретические основы создания лекарственных препаратов.

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

Основы метода. Основные понятия и подходы. Использование библиотек соединений. Основы комбинаторной химии.

### **Тема 4. Алгоритм виртуального скрининга химических соединений**

Типичные фильтры: "лекарствоподобия", "лидероподобия", структурные фильтры, фармакофорные фильтры. Многообразие фильтров. Виртуальный скрининг, основанный на структуре лигандов.

Скрининг, основанный на схожести. Использование SAR/QSAR. Фармакофорный поиск с использованием структуры лиганда. Способы определения фармакофора.

### **Тема 5. Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы.**

Основные подходы, используемые при таком типе скрининга. Трехмерные фармакофоры и их использование для скрининга. Фармакофорный поиск с использованием структуры. Способы формулирования фармакофора. Основные программы и подходы, используемые для виртуального скрининга с использованием фармакофоров.

### **Тема 6. Метод докинга.**

Основные алгоритмические подходы, используемые для докинга. Скоринг. Типы скоринг функций. Наиболее популярные программы докинга.

### **Тема 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.

#### 4.3. Лекции

№ п/п	Название темы	Объем часов
		ОФО
1	Введение в дисциплину	2
2	Алгоритм создания лекарственного препарата.	4
3	Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов.	4
4	Алгоритм виртуального скрининга химических соединений.	6
5	Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы.	4
6	Метод докинга.	4
7	Использование обратного QSAR для создания соединений.	6
Итого:		30

#### 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.	10
5	Проведение докинга: подготовка биомишени, валидация метода (редокинг и кросс-докинг), виртуальный скрининг.	10
Итого:		40

#### 4.5. Лабораторные работы

№ п/п	Название темы	Объем часов
		ОФО
1	Мировой опыт создания лекарственных препаратов	2
2	Дизайн сфокусированных и диверсифицированных библиотек химических соединений	6
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.	8
5	Проведение докинга: подготовка биомишени, валидация метода (редокинг и кросс-докинг), виртуальный скрининг.	6
<b>Итого:</b>		<b>30</b>

#### **4.6. Самостоятельная работа студентов**

№ п/п	Название темы	Вид СРС	Объем часов
			ОФО
1	Алгоритм создания лекарственного препарата	Конспект-схема	10
2	Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов	Подготовка к контрольной работе	10
3	Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы.	Подготовка домашнего задания	13
4	Метод докинга.	Подготовка домашнего задания	10
<b>Итого:</b>			<b>43</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. Гаврилов, А. С. Фармацевтическая технология. Изготовление лекарственных препаратов : учебник / А. С. Гаврилов. – М. : ГЭОТАР-Медиа, 2010. – 624 с.

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

3. Краснюк, И. И. Фармацевтическая технология. Технология лекарственных форм: учебник / И. И. Краснюк, Г. В. Михайлова, Т. В. Денисова, В. И. Скляренко; 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 / И. В. Галкина. – Химия. Казань Казанский государственный университет, 2009. 151 с.

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

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

4. Рудакова, Л. В. Информационные технологии в аналитическом контроле биологически активных веществ : монография / Л. В. Рудакова, О. Б. Рудаков. – 2-е изд., испр. – Санкт-Петербург : Лань, 2022. – 364 с. – ISBN 978-5-81140-1870-1. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/211943> (дата обращения: 03.01.2023). – Режим доступа: для авториз. пользователей.

### ***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.