

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»**

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИБСиБ
_____ А.В. Васин
«30» мая 2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

«Моделирование фармпрепаратов»

Разработчик	Высшая школа биомедицинских систем и технологий
Направление (специальность) подготовки	06.05.01 Биотехнология и биоинформатика
Наименование ООП	06.05.01_01 Биотехнология и биоинформатика
Квалификация (степень) выпускника	биотехнолог и биоинформатик
Образовательный стандарт	СУОС
Форма обучения	Очная

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОП
_____ Д.И. Богомаз
«15» апреля 2025 г.

Соответствует СУОС
Утверждена протоколом заседания
высшей школы "ВШБСиТ"
от «15» апреля 2025 г. № 6

РПД разработал:
Доцент, к.б.н. Д.И. Богомаз

1. Цели и планируемые результаты изучения дисциплины

Цели освоения дисциплины

Приобретение знаний и усвоение принципов компьютерного моделирования в фармакологии, понимания физических механизмов всасывания, перераспределения, биотрансформации, выведения и биологического действия лекарственных средств, а также основ вычислительного моделирования и конструирования лекарств, приобретение навыков самостоятельной постановки и решения прикладных задач в данной области, приобретение навыков использования специализированных прикладных программ.

Результаты обучения выпускника

Код	Результат обучения (компетенция) выпускника ООП
ПК-3	Способен создавать новые диагностические системы и таргетные терапевтические препараты
ИД-1 ПК-3	Создает биологические молекулы и системы с новыми свойствами
ПК-4	Способен масштабировать технологические цепи в производстве таргетных биопрепаратов и оптимизировать для массового использования биоинформатические программные продукты
ИД-2 ПК-4	Оптимизирует биоинформатические программные продукты для массового использования

Планируемые результаты изучения дисциплины

знания:

- Знание методов создания биологических молекул и системы с новыми свойствами
- Знание методов оптимизации биоинформатических программных продуктов для массового использования

умения:

- Умение создавать биологические молекулы и системы с новыми свойствами
- Умение оптимизировать биоинформатические программные продукты для массового использования

навыки:

- Владение методами создания биологических молекул и систем с новыми свойствами

- Владение методами оптимизации биоинформатических программных продуктов для массового использования

2. Место дисциплины в структуре ООП

В учебном плане дисциплина «Моделирование фармпрепаратов» относится к модулю «Модуль цифровых компетенций (Digital)».

Изучение дисциплины базируется на результатах освоения следующих дисциплин:

- Высшая математика
- Физика

3. Распределение трудоёмкости освоения дисциплины по видам учебной работы и формы текущего контроля и промежуточной аттестации

3.1. Виды учебной работы

Виды учебной работы	Трудоёмкость по семестрам
	Очная форма
Лекционные занятия	14
Лабораторные занятия	30
Самостоятельная работа	37
Часы на контроль	16
Промежуточная аттестация (экзамен)	11
Общая трудоёмкость освоения дисциплины	108, ач
	3, зет

3.2. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации

Формы текущего контроля и промежуточной аттестации	Количество по семестрам
	Очная форма
Промежуточная аттестация	
Экзамены, шт.	1

4. Содержание и результаты обучения

4.1 Разделы дисциплины и виды учебной работы

№ раздела	Разделы дисциплины, мероприятия текущего контроля	Очная форма		
		Лек, ач	Лаб, ач	СР, ач
1.	Основы молекулярной фармакологии			
1.1.	Основные понятия фармакологии	1	0	2
1.2.	Межмолекулярные взаимодействия и биосистемы	1	0	4
2.	Фармакокинетика			

2.1.	Основные модели фармакокинетики	1	4	6
2.2.	Процессы фармакокинетики	1	2	5
3.	Фармакодинамика			
3.1.	Связывание и действие лекарств	1	2	4
3.2.	Молекулярные мишени	1	4	4
4.	Моделирование и конструирование лекарств			
4.1.	Методы представления и сопоставления молекул	1	4	4
4.2.	Структура-активность	1	4	4
4.3.	Молекулярное моделирование и конструирование лекарств	6	10	4
Итого по видам учебной работы:		14	30	37
Экзамены, ач				16
Часы на контроль, ач				16
Промежуточная аттестация (экзамен)		11		
Общая трудоёмкость освоения: ач / зет		108 / 3		

4.2. Содержание разделов и результаты изучения дисциплины

Раздел дисциплины	Содержание
1. Основы молекулярной фармакологии	
1.1. Основные понятия фармакологии	Общая и молекулярная фармакология. Понятия фармакокинетики и фармакодинамики. Предмет молекулярной фармакологии. Эмпирические методы поиска лекарственных средств. Комбинаторная химия. Открытие новых лекарственных веществ. Компьютерные методы и фармакология. Объекты и процессы молекулярной фармакологии. Молекулы лекарственных веществ. Формы представления малых молекул и вычислительные методы молекулярной механики. Структурная изомерия и таутомерия. Конфигурационная и оптическая изомерия. Конформации и пространственное строение молекул лекарственных веществ.
1.2. Межмолекулярные взаимодействия и биосистемы	Компьютерное моделирование микро и макромолекул. Водородные и координационные связи. Металлолигандный баланс. Гидратация лекарственных веществ. Молекулы белков и докинг лигандов. Первичная и высшие структуры белков. Белки – основные рецепторы лекарств. Методы установления пространственной структуры белков: методы нейтронно- и рентгенографии, магнитного резонанса, теоретические расчеты. Ручной и автоматический докинг лигандов. Методы Монте-Карло. Штрафные функции докинга. Липиды, углеводы, генные молекулы как объекты молекулярной фармакологии. Структура биомембран. Роль липидов в транспорте, распределении и действии лекарств. Сигнальные и катализирующие функции липидов. Роль углеводов в действии лекарственных веществ. Полисахаридные лиганды. Генные молекулы как факторы и мишени действия лекарств.
2. Фармакокинетика	
2.1. Основные модели фармакокинетики	Компартментные модели. Параметры фармакокинетики. Системное моделирование фармакокинетики. Методы моделирования процессов всасывания, перераспределения, биотрансформации и выведения лекарственных веществ.

2.2. Процессы фармакокинетики	<p>Всасывание лекарственных веществ. Распределение лекарств в организме. Связывание с белками плазмы крови. Тканевая специфичность и тканевые барьеры. Механизмы проникновения лекарств. Пассивная диффузия через липидные бислои: применимость законов Фика и метода Ханша. Гидрофобность и амфифильность. Прогнозирования проницаемости тканевых барьеров. Расчеты гидрофобности. Две фазы биотрансформации, обеспечивающие превращения лекарственных веществ. Индукция микросомальных ферментов. Индукция иммунной защиты. Пути выведения лекарств.</p>
3. Фармакодинамика	
3.1. Связывание и действие лекарств	<p>Механизмы специфического и неспецифического действия лекарств. Принцип Фергюссона. Макроскопические и истинные константы связывания. Основные концепции связывания и молекулярного распознавания. Типы фармакологического действия. Понятие точек действия лекарств. Рецепторный полиморфизм. Свободная энергия связывания. Понятия агонизма, антагонизма и продуктивности действия биологически активных веществ.</p>
3.2. Молекулярные мишени	<p>Основные виды рецепторов. Теории рецепторного действия веществ: оккупационная, индуцированного соответствия, скорости, макромолекулярного возмущения и двухфазного состояния. Операционная теория. Основные сигнальные молекулы и гормоны. Липофильные гормоны: рецепторное действие и его поливалентность; конформация стероидных гормонов; строение рецепторного участка. Гидрофильные сигнальные вещества: производные аминокислот; пептидные медиаторы и белковые гормоны. Конструирование агонистов ретиноидного рецептора. Потенциалзависимые каналы. Строение ионных каналов. Натриевые каналы. Ионные насосы и поляризация. Ионотропные и метаботропные рецепторы. Нейромедиаторы и нейромодуляторы. Лекарственные вещества, действующие на ионные каналы.</p>
4. Моделирование и конструирование лекарств	
4.1. Методы представления и сопоставления молекул	<p>Структурная суперпозиция. Генетические алгоритмы суперпозиции. Поатомная суперпозиция молекул. Полевое представление суперпозиций. Альтернативные методы суперпозиции.</p>

<p>4.2. Структура-активность</p>	<p>Метод сравнительного молекулярного поля: выбор тренировочного и тестового наборов. Гипотеза фармакофоров и суперпозиции. Пространственная сетка и расчет поля. Поиск соотношений структура-активность. Развитие методов 3D-QSAR. Фундаментальные закономерности биологического действия. Характерные молекулярные группировки и их влияние на транспорт, перераспределение, основное и побочное действие, токсичность, метаболизм, элиминация. Количественные соотношения структура-активность. Виды и методы поиска. Программное обеспечение.</p>
<p>4.3. Молекулярное моделирование и конструирование лекарств</p>	<p>Сходство и различие рецепторов психотропных препаратов. Холин- и дофаминергические соединения, нейролептики, транквилизаторы, антидепрессанты, наркотические и ненаркотические анальгетики, анестетики. Препараты других фармакологических групп. Программы для докинга и моделирования лигандов. Молекулярные механизмы действия лекарственных средств. Ретроспектива и состояние метода. Основные практические результаты. Понятия прямой и обратной задач молекулярной фармакологии.</p>

5. Образовательные технологии

1. Основным видом учебных занятий являются: лекции, лабораторные работы, а также самостоятельная работа студентов. Лекции читаются по основным разделам дисциплины и сопровождаются иллюстративным материалом (презентациями), дающим представление о дисциплине «Компьютерное моделирование в фармакологии»
2. Лабораторные занятия закрепляют новые технологические решения, конструкции и элементы, основанные на анализе функционирования клеточных и субклеточных структур, отдельных биологических молекул и их ансамблей. Важнейшие программы в области вычислительной биологии и фармакологии, перспективы развития направления. По каждой лабораторной работе необходимо представить преподавателю отчёты, подготовленные по соответствующей форме. Форма итогового контроля лабораторного практикума является собеседование в свободной форме.
3. В ходе самостоятельной работы студенты углублённо изучают поставленную перед ними задачу в приобретении знаний и усвоение принципов компьютерного моделирования в молекулярной фармакологии. Понимания физических механизмов всасывания, перераспределения, биотрансформации, выведения и биологического действия лекарственных средств, а также основ вычислительного моделирования и конструирования лекарств, приобретение навыков самостоятельной постановки и решения прикладных задач в данной области, приобретение навыков использования

специализированных прикладных программ. В ходе самостоятельной работы студенты готовят курсовую работу в виде доклада-презентации и в виде рукописного текста.

4. Формой итогового контроля является зачет. Подготовка к нему позволяет студентам систематизировать и обобщить все знания, умения и навыки, полученные в ходе изучения курса.

6. Лабораторный практикум

№ раздела	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость, ач
		Очная форма
1.	Молекулярная механика, как метод определения конформаций биологических молекул.	4
2.	Методы молекулярного моделирования.	4
3.	Моделирование фармакокинетики лекарственных средств.	6
4.	Молекулярные мишени	6
5.	Молекулярное моделирование макромолекул рецепторов и лиганд-рецепторных взаимодействий.	4
6.	Моделирование лекарств: квантово-химические расчеты молекул, обладающих биологической активностью.	6
Итого часов		30

7. Практические занятия

Не предусмотрено

8. Организация и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы

Примерное распределение времени самостоятельной работы студентов

Вид самостоятельной работы	Примерная трудоемкость, ач
	Очная форма
Текущая СР	
работа с лекционным материалом, с учебной литературой	8
опережающая самостоятельная работа (изучение нового материала до его изложения на занятиях)	4
самостоятельное изучение разделов дисциплины	8
выполнение домашних заданий, домашних контрольных работ	4
подготовка к лабораторным работам, к практическим и семинарским занятиям	4
подготовка к контрольным работам, коллоквиумам	0
Итого текущей СР:	28
Творческая проблемно-ориентированная СР	
выполнение расчётно-графических работ	0
выполнение курсового проекта или курсовой работы	6
поиск, изучение и презентация информации по заданной проблеме, анализ научных публикаций по заданной теме	3
работа над междисциплинарным проектом	0
исследовательская работа, участие в конференциях, семинарах, олимпиадах	0
анализ данных по заданной теме, выполнение расчётов, составление схем и моделей на основе собранных данных	0
Итого творческой СР:	9
Общая трудоемкость СР:	37

9. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

9.1. Адрес сайта курса

<https://dl-ibmst.spbstu.ru/>

9.2. Рекомендуемая литература

Основная литература

№	Автор, название, место издания, издательство, год (годы) издания	Год изд.	Источник
1	Сенов П.Л. Фармацевтическая химия: М.: Медицина, 1978.	1978	ИБК СПбПУ
2	Хёльте Х.-Д. и др. Молекулярное моделирование: М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010.	2010	ИБК СПбПУ

Дополнительная литература

№	Автор, название, место издания, издательство, год (годы) издания	Год изд.	Источник
1	Машковский М.Д. Лекарственные средства. Т. 1 Т. 1: Харьков: Торсинг, 1997.	1997	ИБК СПбПУ
2	Машковский М.Д. Лекарственные средства. Т. 2 Т. 2: Харьков: Торсинг, 1997.	1997	ИБК СПбПУ

Ресурсы Интернета

1. Информационно-библиотечный комплекс (ИБК) обеспечивает доступ ко всем видам информации, обучает использованию научно-образовательных ресурсов, способствует сохранению, развитию и приумножению интеллектуального и культурного потенциала университета.: <http://library.spbstu.ru/ru/librarymap/>

9.3. Технические средства обеспечения дисциплины

1. Microsoft:

WorkStation + Office Pro Plus

Office 365 ProPlus Enrollment ID: 58313261

Parent Program: 75434048

Сублицензионный договор с ООО «СОФТЛАЙН ПРОЕКТЫ» от 23.10.2017 № 180/17-Д

2. Программа «Защита образования» компании «Лаборатория Касперского» Соглашение № 1CE0151102071341

Договор на оказание услуг по продлению техподдержки бессрочных академических лицензий с ООО «ПОЛИКОМ ПРО» от 23.10.2017 № 182/17-Д

3. Программное обеспечение «Антиплагиат.ВУЗ» Лицензионный договор с ЗАО «Анти-Плагиат» от 26.03.2018 № 170

4. MATLAB Academic Concurrent Licenses

License Attributes for 1094643, 1094644, 1094645 Государственный контракт с ООО «Дорадо Консалтинг» от 14.07.2015 № 111/15-Д

5. Программный пакет автоматизации инженерных расчетов MATHCAD University Edition
Договор на оказание услуг по продлению техподдержки бессрочных академических лицензий с ООО «ПОЛИКОМ ПРО» от 23.10.2017 № 182/17-Д

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Аудитория, оборудованная лекционной доской и предоставляющая возможность демонстрации компьютерных презентаций.

Мобильная система для презентаций: видеопроектор, компьютер, экран.

Персональные компьютеры с выходом в ИНТЕРНЕТ

11. Критерии оценивания и оценочные средства

11.1. Критерии оценивания

Для дисциплины «Моделирование фармпрепаратов» формой аттестации является экзамен. Оценивание качества освоения дисциплины производится в свободной форме.

Оценка «неудовлетворительно» - студент показывает недостаточные знания программного материала, не способен аргументировано и последовательно его излагать, допускаются грубые ошибки в ответах, неправильно отвечает на поставленный вопрос или затрудняется с ответом.

Оценка «удовлетворительно» - студент показывает достаточные, но не глубокие знания программного материала; при ответе не допускает грубых ошибок или противоречий, однако в формулировании ответа отсутствует должная связь между анализом, аргументацией и выводами. Для получения правильного ответа требуется уточняющие вопросы.

Оценка «хорошо» - студент показывает глубокие знания программного материала, грамотно его излагает, достаточно полно отвечает на поставленный вопрос и дополнительные вопросы, умело формулирует выводы. В тоже время при ответе допускает несущественные погрешности.

Оценка «отлично» - студент показывает полные и глубокие знания программного материала, логично и аргументировано отвечает на поставленный вопрос, а также дополнительные вопросы, показывает высокий уровень теоретических знаний.

11.2. Оценочные средства

Оценочные средства по дисциплине представлены в фонде оценочных средств, который является резервной частью основной образовательной программы и размещается в электронной информационно-образовательной среде СПбПУ на портале etk.spbstu.ru

12. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Дисциплина «Компьютерное моделирование в фармакологии» позволяет приобрести знания и усвоение принципов компьютерного моделирования в фармакологии, а также основы вычислительного моделирования и конструирования лекарств, приобретение навыков самостоятельной постановки и решения прикладных задач в данной области, приобретение навыков использования специализированных прикладных программ.

На лекциях преподаватель анализирует наиболее сложные проблемы курса. Программа курса нацелена на развитие у студента навыков научного мышления. Она предполагает знакомство с методами научного эксперимента, его анализа и обобщения и построения математической модели, позволяющей аппроксимировать полученные результаты.

Работа студентов на лабораторных занятиях позволяет им больше познакомиться с методологией научного эксперимента, обработки и анализа полученных данных, а также заставляет учащихся заниматься самостоятельным изучением литературы по курсу и обеспечивает более активное и творческое отношение к выбору дальнейшего направления своих профессиональных интересов.

Важнейшим компонентом курса является самостоятельная работа студентов. Рекомендуется использовать различные формы самостоятельной работы: самостоятельная работа с литературой и Интернет-ресурсами в области молекулярной биологии и биотехнологии. Самостоятельная работа призвана помочь в изучении новых технологических решений, конструкций и элементов, основанных на анализе функционирования клеточных и субклеточных структур, отдельных биологических молекул и их ансамблей. Важнейшие программы в области вычислительной биологии и перспективы развития направления.

13. Адаптация рабочей программы для лиц с ОВЗ

Адаптированная программа разрабатывается при наличии заявления со стороны обучающегося (родителей, законных представителей) и медицинских показаний (рекомендациями психолого-медико-педагогической комиссии). Для инвалидов адаптированная образовательная программа разрабатывается в соответствии с индивидуальной программой реабилитации.