

**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)

«Дизайн лекарственных препаратов (на английском языке)»

Разработчик	Высшая школа биомедицинских систем и технологий
Направление (специальность) подготовки	06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика
Наименование ООП	06.05.01_01 Биоинженерия и биоинформатика
Квалификация (степень) выпускника	биоинженер 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

1. 1. подготовить специалистов в области дизайна лекарственных препаратов
2. 2. полученные знания использовать при проведении расчетов моделирования взаимодействия лекарственных препаратов с элементами клетки.

Результаты обучения выпускника

Код	Результат обучения (компетенция) выпускника ООП
ОПК-7	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности
ИД-1 ОПК-7	Применяет принципы работы современных информационных технологий в профессиональной деятельности.

Планируемые результаты изучения дисциплины

знания:

- Знание принципов работы современных информационных технологий в профессиональной деятельности.

умения:

- Умение использовать принципы работы современных информационных технологий в профессиональной деятельности.

навыки:

- Владение способами применения принципов работы современных информационных технологий в профессиональной деятельности.

2. Место дисциплины в структуре ООП

В учебном плане дисциплина «Дизайн лекарственных препаратов (на английском языке)» относится к модулю «Дисциплины на иностранном языке».

Изучение дисциплины базируется на результатах освоения следующих дисциплин:

- Физика
- Высшая математика

- Цифровая грамотность
- Органическая химия

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

3.1. Виды учебной работы

Виды учебной работы	Трудовоемкость по семестрам
	Очная форма
Лекционные занятия	14
Практические занятия	30
Самостоятельная работа	28
Часы на контроль	25
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	Пр, ач	СР, ач
1.	Введение в дисциплину	2	4	4
2.	Алгоритм создания лекарственного препарата	2	4	4
3.	Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов	2	4	4

4.	Метод докинга.	2	4	4
5.	.Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы.	2	4	4
6.	Использование обратного QSAR для создания соединений	2	4	4
7.	Полуэмпирические методы	2	6	4
Итого по видам учебной работы:		14	30	28
Экзамены, ач				25
Часы на контроль, ач				25
Промежуточная аттестация (экзамен)		11		
Общая трудоёмкость освоения: ач / зет		108 / 3		

4.2. Содержание разделов и результаты изучения дисциплины

Раздел дисциплины	Содержание
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.
2. Алгоритм создания лекарственного препарата	Алгоритм создания лекарственного препарата. Практические и теоретические создание лекарственных препаратов. Использование подхода "золотой пули" - целевого воздействия на данную биологическую мишень. Достоинства и недостатки подхода. Использование информации о биологическом профайлинге соединений для уменьшения числа и силы побочных явлений. Системная биология. Метаболические пути. Взаимодействие протеин-протеин и лекарство-лекарство. Способы осуществления данных взаимодействий. Использование информации системной биологии для создания лекарственных веществ. Понятие хабов биологических взаимодействий и их использование.
3. Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов	Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов. Основы метода. Основные понятия и подходы. Использование библиотек соединений. Основы комбинаторной химии. Отбор библиотек. Разбросанные и сфокусированные библиотеки. Способы отбора соединений для проведения скрининга.
4. Метод докинга.	Докинг и его использование в создании лекарственных препаратов. Основы метода. Основные понятия и подходы. Использование библиотек соединений. Основы комбинаторной химии. Основные алгоритмические подходы, используемые для докинга. Скоринг. Типы скоринг функций. Наиболее популярные программы докинга.

<p>5. .Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы.</p>	<p>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.</p>
<p>6. Использование обратного QSAR для создания соединений</p>	<p>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</p>
<p>7. Полуэмпирические методы</p>	<p>Полуэмпирические методы и основные приближения, используемые в полуэмпирических методах: приближение валентных электронов, приближение нулевого дифференциального перекрывания и его разновидности: CNDO, INDO, MINDO. Метод модифицированного пренебрежения дифференциальным перекрыванием и его разновидности: MNDO, AM1, PM3. Разделение π-и σ-электронов, π-электронное приближение. Сравнительная характеристика полуэмпирических методов, анализ их применимости для решения различных химических задач.</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 об отрасли химии, использующей компьютерное моделирование для решения химических проблем.
2. Лабораторные занятия закрепляют полученные знания, обучают студентов методам получения и разработки алгоритмов, компьютерных программ для прогнозирования атомарных и молекулярных свойств и путей реакции химических реакций. Лабораторные занятия приучают к самостоятельному анализу полученных результатов. Итоговый контроль практических занятий проходит в виде собеседования в свободной форме.
3. В процессе самостоятельной работы студенты должны научиться свободно владеть основными теоретическими понятиями курса, самостоятельно работать с учебниками и

учебными пособиями, самостоятельно работать с научной информацией. Уметь самостоятельно подготовиться к практическим занятиям, используя основную и дополнительную литературу. Формой итогового контроля является экзамен.

6. Лабораторный практикум

Не предусмотрено

7. Практические занятия

№ раздела	Наименование практических занятий (семинаров)	Трудоемкость, ач
		Очная форма
1.	Дизайн сфокусированных и диверсифицированных библиотек химических соединений	6
2.	Формирование библиотек химических соединений для виртуального скрининга с использованием типичных фильтров лекарствовоподобия, лидероподобия, QSAR-моделей	6
3.	Проведение виртуального скрининга химических соединений с использованием фармакофорного поиска, основанного на структуре биомолекулы и лиганда.	6
4.	Проведение докинга: подготовка биомишени, валидация метода (редокинг и кросс-докинг), виртуальный скрининг.	6
5.	Использование биоизостерного замещения в создании лекарственных препаратов	6
Итого часов		30

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	6
опережающая самостоятельная работа (изучение нового материала до его изложения на занятиях)	6
самостоятельное изучение разделов дисциплины	9
выполнение домашних заданий, домашних контрольных работ	0
подготовка к лабораторным работам, к практическим и семинарским занятиям	7
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	0
поиск, изучение и презентация информации по заданной проблеме, анализ научных публикаций по заданной теме	0
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:	0
Общая трудоемкость СР:	28

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	Соколов И.М. Квантовая химия. Теория функционалов плотности, 2020. URL: http://elib.spbstu.ru/dl/2/s20-58.pdf	2020	ЭБ СПбПУ
2	Блюменфельд Л.А., Кукушкин А.К. Курс квантовой химии и строения молекул: Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1980.	1980	ИБК СПбПУ

Дополнительная литература

№	Автор, название, место издания, издательство, год (годы) издания	Год изд.	Источник
1	Панкина И.А. Методические указания по организации и проведению практических занятий по дисциплине «Общая химия и методы химического анализа», 2020. URL: http://elib.spbstu.ru/dl/2/s20-170.pdf	2020	ЭБ СПбПУ

Ресурсы Интернета

1. <http://elib.spbstu.ru/dl/local/2855.pdf>: <http://elib.spbstu.ru/dl/local/2855.pdf>

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-Плагат» от 26.03.2018 № 170

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для изучения курса требуется лекционная аудитория с доской и средствами рисования на ней, а также предоставляющая возможность демонстрации компьютерных презентаций.

Для выполнения лабораторных работ:

стол для микроскопирования НВ-1500 см; стол островной химический НВ-1500 ОПХ; стол передвижной НВ-600 СТП; стол пристенный физический НВ-1500ПК; стол-мойка НВ-1000 МО с сушилкой, двойная раковина из полипропилена; стол для титрования НВ-1400ТП; шкаф вытяжной НВ-1400 ШВп; шкаф для химических реактивов НВ-400 ШР-В односекционный с вытяжным патрубком; блок вытяжной встраиваемый БВ-1; весы электронные НР-60; весы электронные НЛ-100; сушильный шкаф СНОЛ 24/200 стальной; дистиллятор ДЭ-10; водяная баня; печь лабораторная ПМ-10М; центрифуга лабораторная ОЛЦ-3п; термостат; химическая посуда

11. Критерии оценивания и оценочные средства

11.1. Критерии оценивания

Для дисциплины «Дизайн лекарственных препаратов (на английском языке)» формой аттестации является экзамен. Оценивание качества освоения дисциплины производится в свободной форме.

Экзамен

Оценка	Описание
неудовлетворительно	ответ на вопрос отсутствует или в целом не верен.
удовлетворительно	вопрос раскрыт не полно, присутствуют грубые ошибки, однако есть некоторое понимание раскрываемых понятий.
хорошо	вопрос раскрыт, однако нет полного описания всех необходимых элементов.
отлично	вопрос раскрыт полностью, точно обозначены основные понятия и характеристики по теме.

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

12. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

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, обобщения и построения математической модели, позволяющей аппроксимировать полученные результаты.

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

Формой итогового контроля является экзамен. Подготовка к нему позволяет студентам систематизировать и обобщать все знания, умения и навыки, полученные в ходе изучения курса. Предполагаемый практикум призван помочь им в этом.

Подготовка к текущим практическим занятиям осуществляется в процессе самостоятельной работы студентов согласно методическим указаниям, предоставляемым преподавателем на предшествующих занятиях.

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.