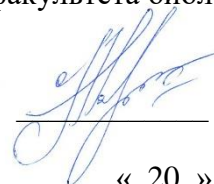


**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова**

Кафедра органической и биологической химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А.Маракаев

« 20 » мая 2021 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Методы моделирования при создании лекарственных средств»**

Направление подготовки  
04.03.01 Химия

Направленность (профиль)  
«Медицинская и фармацевтическая химия»

Форма обучения  
очная

Программа одобрена  
на заседании кафедры  
от 17 мая 2021 г., протокол № 11

Программа одобрена НМК  
факультета биологии и экологии  
протокол № 7 от 17 мая 2021 г.

Ярославль

## **1. Цели освоения дисциплины**

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов знаний об основных подходах и методах, используемых для дизайна активных фармацевтических субстанций (АФС), разработке схем синтеза АФС, предсказании свойств будущих соединений, оптимизации процесса отбора будущих веществ-кандидатов.

Курс формирует у студентов современные представления о взаимосвязи строения и биологической активности лекарственных веществ, о роли супрамолекулярных взаимодействий при формировании фармакологических эффектов.

## **2. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1, и является дисциплиной по выбору. Шифр в соответствии с учебным планом Б1.В.ДВ.05.02.

В рамках освоения дисциплины предусмотрено как теоретическое изучение различных компьютерных программ и методов для моделирования химических соединений, так и практическая часть, включающая занятия по моделированию химических структур различной сложности и их взаимодействий с использованием персональных компьютеров и специализированного программного обеспечения.

Результатом освоения дисциплины является приобретение необходимых профессиональных знаний и навыков, лежащих в основе использования методов компьютерного моделирования химических соединений, а также взаимодействий лекарств с мишенью.

Для обеспечения контроля успеваемости студентов в процессе обучения предусмотрена защита результатов практической деятельности и проведение мероприятий текущего контроля. Итоговой формой контроля по дисциплине является зачет.

Исходные требования, предъявляемые к студентам:

- знание основ органической химии;
- знание основ биохимии и молекулярной биологии;
- владение основами работы на компьютере в программах Microsoft Word, Microsoft Excel, опыт работы с молекулярными редакторами.

### 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретение следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
<b>Профессиональные компетенции</b>		
<p><b>ПК-1</b> Способен проводить НИР и НИОКР, выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.</p>	<p><b>ПК-1.1</b> Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР.</p>	<p><b>Знать:</b> – стадии жизненного цикла лекарственного препарата; – этапы, цели, задачи и методы изысканий и фармацевтической разработки. <b>Уметь:</b> – планировать квантово-химический эксперимент. <b>Владеть навыками:</b> – работы с программным обеспечением реализующим моделирование и дизайн молекулярных систем, предсказание биологической активности.</p>
	<p><b>ПК-1.2</b> Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР.</p>	<p><b>Знать:</b> – перечень документации, необходимой для подготовки планов и программ отдельных этапов НИР. <b>Уметь:</b> – оформлять протоколы исследований. <b>Владеть навыками:</b> – работы с документами, проектами планов и программ отдельных этапов НИР.</p>
	<p><b>ПК-1.3</b> Выбирает технические средства реализации и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.</p>	<p><b>Знать:</b> – основные методические подходы при дизайне химических соединений и лекарственных средств, их возможности, преимущества и недостатки. <b>Уметь:</b> – подбирать необходимые средства реализации дизайна химических структур, активных фармацевтических субстанций и вспомогательных веществ. <b>Владеть навыками:</b> – работы с программами компьютерного моделирования.</p>
	<p><b>ПК-1.4</b> Готовит объекты исследования.</p>	<p><b>Знать:</b> – современные подходы к подготовке моделей. <b>Уметь:</b> – учитывать особенности программ для компьютерного моделирования при создании и оптимизации молекулярных моделей. <b>Владеть навыками:</b> – создания молекулярных моделей; – оценки соответствия исходной модели реальному объекту; – оптимизации и верификации молекулярных моделей.</p>

<p><b>ПК-2</b> Способен осуществлять разработку методов получения и контроля соединений с целевыми характеристиками под руководством специалиста более высокой квалификации.</p>	<p><b>ПК-2.1</b> Способен проектировать направленный синтез органических соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи.</p>	<p><b>Знать:</b> – теоретические основы органической химии; – основы ретросинтетического анализа; – типы реагирующих частиц, интермедиатов и переходных состояний; – основные механизмы химических реакций. <b>Уметь:</b> – планировать направленный синтез химических структур; – оценивать реакционную способность химических соединений. <b>Владеть навыками:</b> – составления схем синтеза; – проведения ретросинтетического анализа; – предсказания свойств получаемых соединений, в том числе оценкой биологической активности.</p>
	<p><b>ПК-2.4</b> Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов.</p>	<p><b>Знать:</b> – зависимости реакционной способности соединений от их химической структуры и условий реализации химических реакций. <b>Уметь:</b> – оценивать пути протекания химических реакций, в том числе с применением методов компьютерного моделирования; – оценивать реакционную способность химических соединений. <b>Владеть навыками:</b> – определения преимущественного протекания контроля химических реакций (зарядовый, орбитальный); – оценки реакционной способности через зарядовый и орбитальный контроль реакций.</p>
	<p><b>ПК-2.5</b> Способен оценивать прогнозировать целевые свойства на основе фундаментальных основ их формирования.</p>	<p><b>Знать:</b> – зависимости физических, химических свойств от химической структуры соединений; – зависимости биологической активности соединений от значений молекулярных дескрипторов (<math>\text{LogP}</math>, молекулярная рефракция, стерические константы Тафта и т.д.). <b>Уметь:</b> – прогнозировать целевые свойства соединений на основе фундаментальных основ их формирования. <b>Владеть навыками:</b> – оценки и прогноза целевых свойств для требуемых соединений.</p>

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 акад.ч.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости  Форма промежуточной аттестации (по семестрам)  Формы ЭО и ДОТ (при наличии)
			Контактная работа					самостоятельная работа	
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания		
1	Введение. Модели и моделирование.	8	2					1	Тест
2	Основы хемоинформатики.	8	4		4	1		4	Отчет по лабораторной работе. Тест
3	Основные методы компьютерного моделирования в химии.		2		2	1		2	Отчет по лабораторной работе. Тест
4	Общие вопросы и частные задачи компьютерного моделирования в химии.	8	2		6	1		2	Отчет по лабораторной работе. Тест
5	Медицинская химия и молекулярный дизайн лекарств.	8	3		2	1		3	Отчет по лабораторной работе. Тест
6	Методы QSAR, докинга и виртуального скрининга.	8	5		4	1		5	Отчет по лабораторной работе. Тест
					2	0,3		11,7	Зачёт
	<b>ИТОГО</b>		<b>18</b>		<b>18</b>	<b>7</b>	<b>0,3</b>	<b>28,7</b>	

#### 4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

##### Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Место проведения занятий в форме практической подготовки
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Основы хемоинформатики.	8			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
2	Основные методы компьютерного моделирования в химии.	8			2				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
3	Общие вопросы и частные задачи компьютерного моделирования в химии.	8			6				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
4	Медицинская химия и молекулярный дизайн лекарств.	8			2				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
5	Методы QSAR, докинга и виртуального скрининга.	8			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	<b>ИТОГО</b>				<b>18</b>				

#### Содержание разделов дисциплины

##### 1. Введение. Модели и моделирование.

- 1.1. Понятие о моделях и моделировании. Классификация моделей.
- 1.2. Этапы постановки компьютерного эксперимента.
- 1.3. Прямая и обратная задачи компьютерного моделирования.

##### 2. Основы хемоинформатики.

- 2.1. Хемоинформатика как область вычислительной химии.
- 2.2. Способы представления химических объектов: линейные, матричные, табличные, трехмерные представления, битовые строки, молекулярные графы.
- 2.3. Химические базы данных.  
Лабораторная работа. Формат SMILES.  
Лабораторная работа. Формат FASTA.  
Лабораторная работа. Формат ExPASy.  
Лабораторная работа. Осуществление поиска информации по химическим базам данных.

##### 3. Основные методы компьютерного моделирования в химии.

- 3.1. Иерархия методов квантово-химического моделирования.
- 3.2. Методы статистического моделирования (Монте-Карло). Генераторы псевдослучайных чисел.

3.3. Методы, основанные на эмпирических потенциалах: молекулярная и броуновская динамика.

3.4. Краткий обзор методов квантовой химии.

3.5. Машинное обучение в химии.

3.6. Методы моделирования дизайна и свойств лекарственных веществ.

Лабораторная работа. Оптимизация молекулярных систем микроцистинов методом молекулярной динамики.

#### **4. Общие вопросы и частные задачи компьютерного моделирования в химии.**

4.1. Создание модели и оптимизация геометрии.

4.2. Верификация оптимизированной модели.

4.3. Учет влияния сольватации в расчетах. Модели учета растворителя.

4.4. Расчет спектральных характеристик.

Лабораторная работа. Оптимизация и верификация модели химического соединения.

Лабораторная работа. Расчет спектральных характеристик салициловой кислоты.

Лабораторная работа. Моделирование ЯМР-спектров.

#### **5. Медицинская химия и молекулярный дизайн лекарств.**

5.1. Жизненный цикл лекарств.

5.2. Объект и предмет медицинской химии.

5.3. Направления и тенденции развития медицинской химии.

5.4. Основные подходы к дизайну и синтезу активных фармацевтических субстанций.

5.5. Краткая характеристика основных методов дизайна лекарств и предсказания их биологической активности.

Лабораторная работа. Определение фармакофоров в молекуле.

#### **6. Методы QSAR, докинга и виртуального скрининга.**

6.1. QSAR и его разновидности.

6.2. Экскурс в историю становления QSAR. Идеи Ганча. Первые молекулярные физико-химические дескрипторы.

6.3. Основная идея и задача QSAR.

6.4. Виды молекулярных дескрипторов.

6.5. Этапы реализации QSAR. Тренировочный и проверочный наборы. Виды валидации модели. Параметры валидации. Предсказание. Отбор числа дескрипторов.

6.6. Подходы QSAR. 3D QSAR и его методы. Применение QSAR.

6.7. Особенности моделирования крупных молекул.

6.8. Виртуальный скрининг, основанный на модели лиганда.

6.9. Виртуальный скрининг, основанный на модели мишени.

6.10. Молекулярный докинг и его задачи. Концепция ключ-замок.

6.11. Жесткий и гибкий докинг.

6.12. Алгоритмы докинга и поиска оценочной функции.

Лабораторная работа. Создание библиотеки химических данных.

Лабораторная работа. Расчет LogP.

### **5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

**Вводная лекция** – предназначена для начального ознакомления студентов с изучаемой дисциплиной, целями и задачами курса. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках изучения данной дисциплины, а также предлагается обзор рекомендуемой учебно-методической литературы.

**Академическая лекция** (лекция общего курса) – последовательное изложение учебного материала в соответствии с темой занятия. Как правило, проводится в виде

доклада, сопровождаемого иллюстрированной презентацией, содержащей информативную часть, примеры и пояснения к изучаемому материалу.

**Лабораторное занятие** – занятие, посвященное практическому освоению методов компьютерного моделирования.

**Консультации** – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

**Электронный учебный курс «Методы моделирования при создании лекарственных средств»** в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы обучающихся по темам дисциплины;
- осуществляется проведение отдельных мероприятий текущего контроля успеваемости студентов;
- представлены тексты лекций по отдельным темам дисциплины;
- представлены правила прохождения промежуточной аттестации по дисциплине;
- представлен список учебной литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- представлена информация о форме и времени проведения консультаций по дисциплине в режиме онлайн;
- представлена информация о формах синхронного и асинхронного взаимодействий между обучающимися и преподавателем в рамках изучения дисциплины.

#### **6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- офисный пакет приложений Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome;
- химический редактор ChemSketch или его аналог;
- МОРАС2012 (академическое некоммерческое использование бесплатно), Jmol (GPL), Avogadro (Open Source), EMBOSS (GNU GPL), Firefly.

#### **7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)**

В процессе осуществления образовательного процесса по дисциплине используются:

- автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT» [http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)
- база данных Protein Data Bank (PDB) <http://www.rcsb.org/pdb/> (получение трехмерных структур белков и биологических макромолекул);
- онлайн-сервис Basic Local Alignment Search Tool (BLAST) <http://blast.ncbi.nlm.nih.gov/Blast.cgi> (поиск сходных последовательностей и локального выравнивания);
- онлайн-сервис Multiple sequence alignment (MSA) <http://www.ebi.ac.uk/Tools/msa/> (множественное выравнивание нескольких последовательностей);
- онлайн-сервис ScanProsite <http://ca.expasy.org/tools/scanprosite/> (сканирование последовательностей, поиск мотивов и паттернов);
- база данных ChemSpider <http://www.chemspider.com/> (поиск свойств химических структур);
- база спектральной информации «SpectraBase» <https://spectrabase.com/>



## **8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины**

### **а) основная литература**

1. Паничев, С.А. Математические модели в естественных науках: химия : учебное пособие для вузов / С.А. Паничев, Л.П. Паничева, С.С. Волкова. – 2-е изд. – Москва : Издательство Юрайт, 2021. – 265 с.

<https://urait.ru/bcode/476030>

### **б) дополнительная литература**

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: 2-е издание. – М. : Бином. Лаборатория знаний, 2012. – 496 с.

[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1274957&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1274957&cat_cd=YARSU)

2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие / В.И. Барановский. – М.: Академия, 2008. – 383 с.

[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1219858&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1219858&cat_cd=YARSU)

### **в) ресурсы сети «Интернет» (при необходимости)**

1. Введение в хемоинформатику: Компьютерное представление химических структур: учеб. пособие / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. – Казань, Москва, Страсбург, 2020. – 176 с.

[https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfxNnSrvdTwhgmXb-nFvTqSkTu-I5EOH\\_5sVQjgRtReFXfRg/viewform](https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSfxNnSrvdTwhgmXb-nFvTqSkTu-I5EOH_5sVQjgRtReFXfRg/viewform)

2. Группа VK «Институт биоинформатики» <https://vk.com/bioinf>

## **9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения лабораторных работ;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

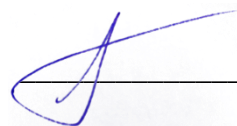
Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока.

Автор:

Доцент кафедры  
органической и биологической химии, к.х.н.



Лебедев А.С.

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины  
«Методы моделирования при создании лекарственных средств»**

**Фонд оценочных средств  
для проведения текущего контроля успеваемости  
и промежуточной аттестации студентов  
по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,  
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

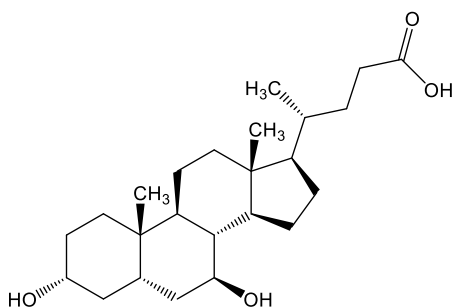
**Типовые примеры заданий при проведении тестирований**

**Тестирование по темам 1-4**

1. Химическая формула, нарисованная в графическом редакторе, относится к... типу моделей  
А. Статическому  
Б. Динамическому
2. Выберите группу методов статистического моделирования.  
А. Методы молекулярной динамики  
Б. Методы теории функционала плотности  
В. Полуэмпирические методы  
Г. Методы броуновской динамики  
Е. Методы Хартри-Фока  
Ж. Методы Монте-Карло
3. К линейному представлению химических объектов относится формат...  
А. PDB  
Б. MOL  
В. SMILES  
Г. SDF
4. Укажите CAS-номер для соединения «Ацетон». Введите номер с учетом дефисов и без лишних пробелов.
5. Укажите число свободно вращающихся связей у соединения CAS 100-41-4.

**Тестирование по темам 5-6**

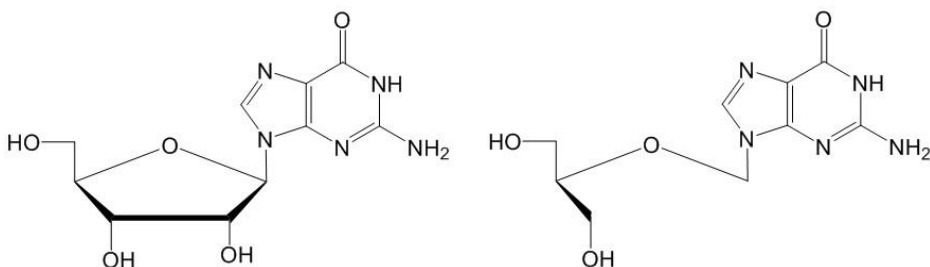
1. Кросс-валидация по методу LOO является надежным методом оценки качества предсказания модели. Верно ли данное утверждение?  
А. Да  
Б. Нет +
2. В основе QSAR лежит идея...  
А. Дисперсионного анализа  
Б. Регрессионного анализа  
В. Кластерного анализа  
Г. Дискриминантного анализа
3. Сколько акцепторов водорода имеется у указанного ниже соединения?



4. Гидрофобность органических соединений увеличивают следующие функциональные группы...

- А.  $\text{CH}_3$  +
- Б.  $\text{OH}$
- В.  $\text{NO}_2$
- Г.  $\text{CONH}_2$
- Д.  $\text{Cl}$  +

5. Какая концепция дизайна лекарств более применима к данным соединениям?



- А. Модификация действующего фрагмента
- Б. Удаление лишнего +
- В. Биоизостеризм

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

#### **Правила выставления оценки по результатам тестирования**

- *Отлично* выставляется за 85% правильных ответов и более.
- *Хорошо* выставляется за 65% правильных ответов и более.
- *Удовлетворительно* выставляется за 50% правильных ответов и более.
- *Неудовлетворительно* выставляется при наличии менее 50% правильных ответов или при отказе обучающегося пройти тестовый контроль.

#### **Защита лабораторных работ**

Защита лабораторных работ проходит в формате общения с преподавателем по результатам проведенных лабораторных работ и оценивается по двухбалльной системе: «зачтено» или «незачтено».

Критерии оценки защиты лабораторной работы студента:

Зачтено: студент уверенно отвечает на все поставленные преподавателем вопросы. Лабораторная работа надлежащим образом оформлена в рабочем журнале, а выводы соответствуют поставленным задачам. По окончании оценивания в рабочем журнале выставляется соответствующая отметка в виде росписи преподавателя.

Не зачтено: дано неправильное или же, в значительное степени, неполное раскрытие поставленных вопросов с серьезными пробелами и сбоями в логике изложения материала, некорректное оформление или отсутствие оформленной лабораторной работы в рабочем журнале, некорректно сделанные выводы.

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

## 2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

### Список вопросов к зачету

2. Моделирование и модели. Определение, функции, классификация. Компьютерное моделирование и его этапы.
3. Прямая и обратная задачи компьютерного моделирования. Типичный алгоритм проведения вычислений.
4. Хемоинформатика как область знаний. Задачи хемоинформатики.
5. Способы представления химических объектов: линейные, матричные, табличные, трехмерные представления, битовые строки, молекулярные графы.
6. Метод Монте-Карло. Детерминированный хаос. Генерация случайных (псевдослучайных) чисел. Физические (аппаратные), табличные, алгоритмические ГПСЧ.
7. Методы молекулярной и броуновской динамики. Особенности и применение.
8. Методы квантовой химии.
9. Методы машинного обучения в химии.
10. Создание молекулярных моделей: редакторы, основные подходы к созданию моделей. Способы сохранения (способы построения) геометрической конфигурации молекул.
11. Химические базы данных. Значение для хемоминформатики.
12. Оптимизация геометрии молекулярной системы. Назначение, методы, алгоритмы оптимизации. Верификация оптимизированной модели. Критерии сходимости.
13. Поверхность потенциальной энергии и ключевые точки.
14. Учет влияния сольватации и ее типы. Дискретные и континуальные модели.
15. Дискретные сольватационные модели.
16. Континуальные сольватационные модели.
17. Получение спектральных характеристик. Расчет (предсказание) ИК-спектров. Мнимые частоты в колебательном спектре. Модель гармонического осциллятора. Обертон и составные частоты. Получение электронных спектров.
18. Жизненный цикл лекарственных средств. Этапы изысканий и фармацевтической разработки.
19. Медицинская химия: определение, предмет и объект, связь с другими науками, основные понятия. Фундаментальные проблемы органической химии.
20. Исторические аспекты получения лекарственных средств. Первые синтетические лекарства. Основные источники лекарств.
21. Основные концепции синтеза новых лекарств. Концепция фармакофора.
22. Понятия лекарства и биомишени. Типы биомишеней.
23. Современные концепции конструирования лекарств. Понятие лиганда и мишени.
24. High Throughput Screening и комбинаторный синтез.
25. Принципы QSAR и молекулярного докинга.
26. Регрессионный анализ как один из инструментов поиска новых лекарств и предсказания фармацевтической активности. Простая и множественная регрессия. Понятия фармакокинетики и фармакодинамики.
27. Прямой и обратный QSAR и QSPR. Типы молекулярных дескрипторов. Понятие биологической активности.
28. Уравнение Ганча. Дескрипторы P,  $\pi$ , MR. Расчет LogP.
29. Этапы проведения QSAR. Понятия тест- и кросс-валидации, их преимущества и недостатки. Принципы отбора молекулярных дескрипторов.

30. QSAR-подходы: понятия 1D, 2D, 3D, 4D, 5D, 6D-QSAR. Основные методы 3D-QSAR.
31. Молекулярный докинг: определение, задачи, варианты реализации. Модель фармакофора.
32. Типы супрамолекулярных взаимодействий и их роль в формировании фармакофорных моделей.
33. Виртуальный скрининг как инструмент отбора хитов. Виртуальный скрининг по лиганду и мишени.

### **Оценка устного ответа на зачете**

Устный ответ на зачете оценивается по 2 балльной системе.

Отметка **«зачтено»** ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- студент свободно владеет научной терминологией;
- ответ студента структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов по вопросу билета;
- логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ иллюстрируется примерами, в том числе из собственной практики;
- студент демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию.

Отметка **«незачтено»** ставится, если:

- обнаружено незнание или непонимание студентом сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов билета не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые студент не может исправить самостоятельно; - на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета студент затрудняется дать ответ или не дает верных ответов.

## **Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Методы моделирования при создании лекарственных средств»**

### **Методические указания для студентов по освоению дисциплины**

В рамках изучения курса «Методы моделирования при создании лекарственных средств» предусмотрены лекционные занятия в объеме 18 часов, а также лабораторные занятия по отработке методов компьютерного моделирования различных органических структур - 18 часов.

Освоение дисциплины «Методы моделирования при создании лекарственных средств» направления подготовки «Химия» направлено на формирование у студентов теоретической базы для понимания принципов компьютерного моделирования в химии в том числе при создании лекарственных средств.

Для успешного и полного освоения курса обязательным является посещение всех лекций. Выполнение задач на занятиях служит для закрепления изученного лекционного материала и усвоения рассматриваемых тем и разделов.

Самостоятельная работа студентов предполагает работу, аналогичную той, что проводилась на лабораторных занятиях с целью закрепления умений и навыков работы с программным обеспечением.

Для контроля усвоения теоретического материала в течение семестра проводятся мероприятия текущей аттестации в виде тестирований. При необходимости проводятся консультации по вопросам, вызывающим затруднения при изучении материала.

Итоговой формой контроля по данной дисциплине является зачет. Для эффективной подготовки студентам рекомендуется использовать материалы лекций, лабораторных работ, а также учебную литературу, указанную в разделе 8 и интернет-ресурсы, указанные ниже.

### **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине**

Для самостоятельной работы студентов рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе 8 данной программы.

Также для подбора учебной литературы рекомендуется использовать ряд интернет-ресурсов:

1. [http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php) Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ: более 3000 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете.
2. <https://urait.ru/> Электронно-библиотечная система «Юрайт»: мультидисциплинарный ресурс (учебная, научная и художественная литература, периодика)
3. <http://window.edu.ru/catalog> Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам": свободный доступ к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.