

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна»
(СПбГУПТД)

УТВЕРЖДАЮ
Первый проректор, проректор
по УР

_____ А.Е. Рудин

Рабочая программа дисциплины

Б1.В.11

Компьютерные методы оценки связи структура-биологическая
активность

Учебный план: 2026-2027 04.05.01 ИПХЭ Медицинская химия ОО №3-1-155.plx

Кафедра: **44** Теоретической и прикладной химии

Направление подготовки:
(специальность) 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: специализация "Медицинская химия"
(специализация)

Уровень образования: специалитет

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоё мкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Практ. занятия				
9	УП	33	33	41,75	0,25	3	Зачет
	РПД	33	33	41,75	0,25	3	
Итого	УП	33	33	41,75	0,25	3	
	РПД	33	33	41,75	0,25	3	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утверждённым приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652

Составитель (и):

доктор химических наук, Профессор

Зыкова Ирина Викторовна

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии

Новоселов Николай
Петрович

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Новоселов Николай
Петрович

Методический отдел:

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: Формирование компетенций обучающихся в области основ и возможностей методов анализа и установления особенностей органических и неорганических веществ в связи с их потенциальной биологической активностью, направленных на умение решать задачи по установлению особенностей химической структуры потенциально биологически активных соединений, а также лекарственных средств, и их воздействия на системы организма

1.2 Задачи дисциплины:

Рассказать о возможностях различных подходов к изучению зависимости потенциальной биологической активности от особенностей строения органических физиологически активных соединений. Основные достоинства и недостатки методов, особенности их применения в зависимости от постановки задачи на исследование.

Научить основам различных методов анализа органических соединений и использованию полученных данных для изучения зависимости биологической активности потенциально физиологически активных соединений от их строения.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Бионеорганическая химия

Квантовая химия

Строение вещества

Медицинская химия

Методы органической и медицинской химии в оптимизации структурных прототипов лекарств

Информационные технологии в научной деятельности

Математика

Информационные технологии

Вычислительные методы в химии

Физическая химия

Химические основы биологических процессов

Основы анатомии и физиологии человека

Основные аспекты фармакологии

Биология с основами экологии

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ПК-8: Способен определять сферы применения результатов научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в области химии, в том числе медицинской					
Знать: специализированное программное обеспечение для математических методов установления корреляционной зависимости фармакокинетических параметров и биофармацевтических характеристик с целью применения в различных сферах медицины					
Уметь: анализировать результаты фармакогенетических методов исследований, применяемых для решения задач персонализированной медицины, используя специализированное программное обеспечение и компьютерную технику					
Владеть: навыками использования специализированного программного обеспечения для оценки связи структура-биологическая активность с целью внедрения результатов в практическую деятельность					

3 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)		
Раздел 1. Введение. История и методология моделирования структура-свойство. Дескрипторы. Классификация дескрипторов	9				О
Тема 1. Введение. История моделирования "структура-свойство" Практическое занятие: "Знакомство с программой QSAR Toolbox"		2	2	2,75	
Тема 2. Методология моделирования "структура-свойство".		2		4	

Тема 3. Дескрипторы. Классификация дескрипторов Практическое занятие: "Проведение первых расчётов с помощью QSAR Toolbox"		2	2	4	
Раздел 2. Математические модели. Построение и валидация					
Тема 4. Предобработка данных. Общие принципы построения моделей Практическое занятие: "Предсказание свойств индивидуальных веществ"		3	2	4	
Тема 5. Общие принципы валидации моделей. Границы применимости моделей Практическое занятие: "Предсказание свойств смеси веществ"		3	2	4	О
Тема 6. Стандартный набор требований к построению и валидации моделей "структура-свойство" Практическое занятие: "Предсказание экологических и токсикологических параметров"		3	2	4	
Раздел 3. Модели "структура-свойство" для предсказания свойств различных химических объектов. Предсказания биологической активности					
Тема 7. Предсказание свойств индивидуальных соединений. Предсказание свойств смесей химических соединений Практическое занятие: "Предсказание токсичности индивидуальных веществ и их смесей на примере рыб"		3	3	3	
Тема 8. Предсказание свойств наноматериалов и гетерогенных катализаторов Практическое занятие: "Предсказание свойств наноматериалов и гетерогенных катализаторов"		3	4	3	
Тема 9. Моделирование кинетики химической реакции Практическое занятие: "Расчет потенциала сенсибилизации кожи с учётом её метаболизма"		3	4	3	О
Тема 10. Методы 3D-QSAR, зависящие от выравнивания молекул. Практическое занятие: "Методы 3D-QSAR, не требующие предварительного выравнивания молекул"		3	4	3	
Тема 11. Методы 3D-QSAR, использующие структуру биологической мишени. Предсказание биологической активности Практическое занятие: "Предсказание мутагенности по Амесу с использованием метода read-across"		3	4	3	
Тема 12. Методы 4D-QSAR и ND-QSAR. Практическое занятие: "Моделирование Структура-Условие-Свойство"		3	4	4	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		33	33	41,75	
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)		0,25			
Всего контактная работа и СР по дисциплине		66,25		41,75	

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5 БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ

Использование балльно-рейтинговой системы не предусмотрено.

6. ОПИСАНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ, КРИТЕРИЕВ, СИСТЕМЫ И СРЕДСТВ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ

6.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения
ПК-8	Характеризует основные методы математической статистики, используемые для установления зависимости между структурой и биологической активностью лекарственных препаратов Анализирует данные, полученные путем применения методов оценки связи структура-биологическая активность с целью разработки лекарственных препаратов для персонализированной медицины Применяет методы оценки связи структура-биологическая активность с целью разработки лекарственных препаратов для персонализированной медицины

6.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся демонстрирует всестороннее, систематическое и глубокое знание основного и дополнительного учебного материала, правильно решает практическое задание; демонстрирует критический, оригинальный подход к материалу.	
Не зачтено	Обучающийся показывает незнание основного учебного материала, допускает принципиальные ошибки при ответе	

6.3 Типовые контрольные задания и/или иные материалы, используемые для оценки результатов обучения

6.3.1 Типовые контрольные вопросы

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 9	
1	Дать определение свободного вильсоновского анализа с примерами.
2	Напишите области применения QSAR.
3	Укажите две базы данных ADME.
4	Укажите биохимические базы данных.
5	Дайте определение молекулы свинца и приведите примеры.
6	Объяснить правило Липински
7	Дать определение случайного скрининга для оптимизации ведущей молекулы.
8	Дать определение COMFA и COMSIA.
9	Написать приложения фармацевтических баз данных.
10	Дать определение глобального минимума.
11	Укажите методы оптимизации лидов.
12	Дайте определение биоизостеризма и приведите примеры.
13	Объяснить анализ Ханша.
14	Сравните SAR и QSAR.
15	Дайте определение COMSIA и укажите два его применения.
16	Дайте определение химической информатики и укажите две области ее применения.
17	Приведите две любые фармацевтические базы данных.
18	Как получают базы данных ADME.
19	Дать определение локального минимума.
20	Перечислите различные этапы разработки лекарственных средств.
21	Дайте определение случайного и неслучайного скрининга.
22	Дайте определение коэффициента разделения и logP.
23	Перечислите электронные и стерические дескрипторы QSAR.
24	Что такое дизайн лекарственных средств?
25	Что такое CoMFA и CoMSIA

26	Дайте определение понятию QSAR.
27	Почему при изучении коэффициента разделения используется н-октанол?
28	Применение химических баз данных.

6.3.2 Типовые тестовые задания

не предусмотрены

6.3.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. Изобразите форму поверхности жидкости у вертикальной стенки при несмачивании. Отметьте краевой угол.

2. Закончите фразу: При увеличении радиуса капилляра в 2 раза высота поднятия жидкости в капилляре

...

3. Каким видом транспорта – активным или пассивным, - является диффузия через поры?

Аргументируйте ответ на конкретном примере.

4. Известно, что в сайте связывания биологической мишени присутствует остаток тирозина. Какие структурные фрагменты можно было бы включить в структуру взаимодействующего с этим сайтом лиганда? Ответ поясните

5. Дано пространственное изображение молекулы. Какие фармакофорные центры можно выделить в ее структуре?

6. По каким связям в следующей структуре (дано пространственное изображение молекулы) возможно свободное вращение?

7. Какие параметры молекулы учитываются при проведении виртуального скрининга методом молекулярного докинга? Приведите примеры.

8. Почему молекулы воды могут создавать препятствия для проведения молекулярного докинга. Какие есть варианты решения этих проблем?

9. Приведите примеры ошибок в структурах молекул, которые могут очень сильно повлиять на расчёты при докинге..

6.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения

6.4.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

6.4.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная

+

Письменная

Компьютерное тестирование

Иная

6.4.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

На подготовку ответа предоставляется 0,3 часа.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
7.1.1 Основная учебная литература				
Лаппи, Ф. Э., Морозов, П. В.	Расчет и компьютерное моделирование переходных процессов в линейных цепях (от простого к сложному)	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2019	http://www.iprbookshop.ru/98814.html
Боев, В. Д., Сыпченко, Р. П.	Компьютерное моделирование	Москва: Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Ай Пи Ар Медиа	2025	https://www.iprbookshop.ru/146350.html
7.1.2 Дополнительная учебная литература				
Тупик, Н. В.	Компьютерное моделирование	Саратов: Вузовское образование	2019	http://www.iprbookshop.ru/79639.html
Ефимова И.Ю., Варфоломеева Т.Н.	Компьютерное моделирование	Москва: Флинта	2019	https://books.ru/reading.php?short=1&productid=352064
Пушкарева, А. Е., Кузнецова, А. А.	Компьютерное моделирование в оптике биотканей	Санкт-Петербург: Университет ИТМО	2016	http://www.iprbookshop.ru/66517.html

Ермин Д. А., Корней Н. Г.	Компьютерное моделирование	СПб.: СПбГУПТД	2018	http://publish.sutd.ru/tp_ext_inf_publish.php?id=2018385
Коткин, Г. Л., Попов, Л. К., Черкасский, В. С.	Компьютерное моделирование физических процессов с использованием MATLAB	Новосибирск: Новосибирский государственный университет	2017	http://www.iprbookshop.ru/93459.html

7.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

1. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. URL:<http://window.edu.ru/>.
2. Электронно-библиотечная система IPRbooks: <http://www.iprbookshop.ru>
3. Электронная библиотека учебных изданий СПбГУПТД: <http://publish.sutd.ru>
4. Единый портал интернет тестирования в сфере образования [Электронный ресурс]. URL:<http://www.i-exam.ru/>.
5. Материалы Информационно-образовательной среды заочной формы обучения СПбГУПТД [Электронный ресурс]. URL:http://sutd.ru/studentam/extramural_student/.
6. QSAR Toolbox
7. PASS Online

7.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional
Microsoft Windows

7.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Компьютерный класс	Мультимедийное оборудование, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска