

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

2.1.8.2
(индекс дисциплины)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Методы высокопроизводительного скрининга

(наименование дисциплины)

по научной специальности
1.4.16 Медицинская химия

Форма обучения: очная

Год набора: 2026

Общая трудоемкость: 3 ЗЕ

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	6	Итого
Форма контроля	зачет	
Вид занятий		
Лекции	4	4
Лабораторные	2	2
Практические	2	2
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР		
Промежуточная аттестация	0,25	0,25
Контактная работа	8	8
Самостоятельная работа	99,75	99,75
Контроль	-	-
Итого	108	108

Рабочую программу составил(и):

доцент, Бунев А.С.
профессор, к.б.н., Хоченков Д.А.
доцент, к.м.н., Петров А.В.

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рецензирование рабочей программы дисциплины:



Отсутствует



Рецензент

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГТ и учебного плана
научной специальности

1.4.16 Медицинская химия

Срок действия рабочей программы дисциплины до «31» августа 2030 г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании центра медицинской химии
(протокол заседания № 1 от «28» августа 2025 г.).

1. Цель освоения дисциплины

Формирование фундаментальных представлений о методах высокопроизводительного скрининга при разработке лекарственных препаратов.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина:
«Молекулярное моделирование физиологически-активных веществ»,
«Дополнительные главы медицинской химии».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Медицинская химия».

3. Планируемые результаты обучения

Знать:

- методы высокопроизводительного скрининга,
- оснащение, используемое в скрининге лекарственных препаратов, подходы к количественному определению, используемые в методах скрининга,
- способы детекции результатов, статистической обработка результатов скрининга,
- методики скрининга для выявления механизма действия новых БАВ,
- методы биоинформатики в скрининге при разработке лекарственных препаратов, базы данных биологической и химической информации.

Уметь:

- - выбрать методики для скрининга биологической активности лекарственного препарата, обработки и представления полученных результатов.

Владеть:

- навыками планирования эксперимента оценки биологической активности лекарственных препаратов с помощью высокопроизводительного скрининга,
- основным инструментарием и навыками для осуществления высокопроизводительного скрининга.

4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лек 1	Высокопроизводительный и высокоинформативный скрининг Системы скрининга.	6	2	-	-	
	Пр 1	Высокопроизводительный скрининг. Оборудование для проведения высокопроизводительного скрининга.	6	2	-	-	
	Лаб 1	Регистрация биохимических изменений	6	2	-	-	
	Лек 2	Сущность и препараты полученные методом структурно – ориентированного дизайна.	6	2	-	-	
	Пр 2	Высокоинформативный скрининг. Оборудование для проведения высокоинформативного скрининга	6	2	-	-	
	Лек 3	Методики скрининга для выявления механизма действия новых БАВ	6	2	-	-	
	Лаб 2	Статистическая обработка результатов скрининга.	6	2	-	-	

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лек 4	Методы биоинформатики в скрининге при разработке лекарственных препаратов.	6	2	-	-	
	Ср	Изучение лекционного материала и оригинальной литературы. Подготовка к зачету	6	99,75	-	-	Вопросы к зачету №№ 1-40.
	ПА	Промежуточная аттестация	6	0,25	-	-	Вопросы к зачету №№ 1-40.
Итого:				108			

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины используется технология традиционного обучения – организация учебного процесса в вузе, основанная на зачетной форме обучения. К формам обучения относятся лекции, лабораторные работы и практические занятия, а также самостоятельная работа.

6. Методические указания по освоению дисциплины

Самостоятельная работа – это совокупность всей самостоятельной деятельности, как в учебной аудитории, так и вне ее, в контакте с преподавателем и в его отсутствии.

Самостоятельная работа реализуется:

- непосредственно в процессе аудиторных занятий.
- в контакте с преподавателем вне рамок расписания – консультации по учебным вопросам и при выполнении творческих и индивидуальных заданий.
- в виде внеаудиторной самостоятельной работы.

Самостоятельная работа студентов предполагает более углубленное освоение материала практических занятий, отдельных вопросов материала курса, выносимых на самостоятельное изучение, а также творческих заданий, связанных с образовательной и научной исследовательской деятельностью.

7. Оценочные средства

7.1. Паспорт оценочных средств

Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
6		Вопросы к зачету №№ 1-40

7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

7.2.1. Вопросы для самостоятельного изучения

Методы высокопроизводительного скрининга в разработке лекарственных препаратов оснащение, используемое в скрининге БАВ. Оснащение для проведения реакции: макро варианты (пробирочный метод); микро вариант – история, современное состояние метода; иные варианты. Оборудование для дозирования: ручное дозирование, станции дозирования. Детекция результатов воздействия: визуальные методы, инструментальные методы: спектрофотометрия, флуоресценция/люминисценция, примеры используемого оборудования. Технологии роботизации процесса скрининга.

Подходы количественного определения, используемые в методах скрининга: химические индикаторы изменения состояния клеток (живые/мертвые) , индикаторы мембранного потенциала; индикаторы ионов кальция. Генетические инструменты визуализации. Регистрация биохимических изменений: общие положения, экспрессия и очистка рекомбинантных ферментов, пептидазы, оксидоредуктазы, трансферазы, киназы.

Результаты скрининга. Статистическая обработка результатов скрининга: основные показатели (IC₅₀, EC₅₀ и пр.), статистические параметры.

Методики скрининга для выявления механизма действия новых БАВ. Скрининг для выявления клеточных мишеней: классическая и химическая генетика, идентификация биологически активных молекул, идентификация мишени, использование методов генетической инженерии для выявления потенциальных мишеней лекарств.

Методы биоинформатики в скрининге при разработке лекарственных препаратов: основные положения, базы данных биологической и химической информации, виртуальный скрининг, количественная зависимость структура-активность (QUSAR).

7.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 6

№ п/п	Вопросы к зачёту
1	Сущность высокопроизводительного скрининга.
2	Высокоинформативный скрининг.
3	Отличие высокопроизводительного скрининга от высокоинформативного скрининга.
4	Оснащение для проведения скрининга.
5	Оборудование для дозирования.
6	Инструментальные методы для детекции результатов скрининга.
7	Химические индикаторы изменения состояния клетки.
8	Идентификация биологически активных молекул.
9	Идентификация мишеней.
10	Методы биоинформатики.
11	Базы биологической и химической информации.
12	Виртуальный скрининг.
13	Лиганд-ориентированный виртуальный скрининг
14	Структурно-ориентированные методы скрининга
15	Сущность молекулярного докинга.
16	Основные проблемы и недостатки молекулярного докинга.
17	Функции выигрыша в молекулярном докинге.
18	Понятия о скоринге в молекулярном докинге.
19	Используемые алгоритмы оптимизации в молекулярном докинге.
20	Связь высокопроизводительного скрининга и молекулярного докинга.
21	Роль фармакофоров в виртуальном скрининге.
22	Связь дескрипторов и высокопроизводительного скрининга.
23	Библиотеки химических соединений
24	Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций)
25	Основы двумерного субструктурного поиска.
26	Преимущества трехмерных баз данных перед двумерными.
27	Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомакромолекул.
28	Определение трехмерных фармакофоров и биоизостерных групп.
29	Картография фармакофора.
30	Проблемы расчета трехмерных фармакофоров.
31	Включение дополнительных геометрических особенностей в трехмерный фармакофор
32	Источники данных для трехмерных баз данных
33	Фармакофрные ключи

34	Дизайн и создание виртуальных комбинаторных библиотек. Основные принципы создания библиотек
35	Кластеризация: индексы подобия, понятие о структурном разнообразии
36	Фильтрация библиотек, исключение токсифорных групп. PAINS. Аннотирование библиотек.
37	Методы виртуального скрининга, основанные на лигандах.
38	Интерпретация результатов виртуального скрининга. Понятие о вероятностном характере распределения результатов.
39	Ложноположительные и ложноотрицательные результаты. ROC-кривая и показатель AUC.
40	Коэффициент обогащения результатов виртуального скрининга. Success-rate: эффективность виртуального скрининга

7.3.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
6	Зачёт (устно)	«зачтено»	Достаточно полные ответы на вопросы теоретического характера.
		«не зачтено»	Ответы на вопросы теоретического характера неполные или неверные.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно- методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Хёльте Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г.	Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хёльте, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс ; перевод А. А. Олиференко [и др.]. – 5-е изд. – Москва : Лаборатория знаний, 2020. – 320 с. – ISBN 78-5-00101-724-0. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/40388.html	Учебное пособие	2020	ЭБС «IPRbooks», ЭБС «Лань»

8.2. Дополнительная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Степанов В.М. ред. Спирин А.С.	Степанов, В. М. Молекулярная биология. Структура и функция белков : учебник / В. М. Степанов ; под редакцией А. С. Спирин. – Москва : Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2005. – 336 с. – ISBN 5-211-04971-3. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/13144.html	Учебник	2005	ЭБС «IPRbooks»
2	Гуреев М.А.	Молекулярный докинг и его верификация в контексте виртуального скрининга / М.А. Гуреев, В.В. Кадочников, Ю.Б. Порозов. – СПб: Университет ИТМО, 2018. – 50 с. – URL: http://books.ifmo.ru/file/pdf/2377.pdf		2018	Электронное издание

8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

- WebofScience [Электронный ресурс]: мультидисциплинарная реферативная база данных. – Philadelphia: ClarivateAnalytics, 2016 – Режим доступа: apps.webofknowledge.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Scopus [Электронный ресурс]: реферативная база данных. – Netherlands: Elsevier, 2004 – Режим доступа: scopus.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Elibrary [Электронный ресурс]: научная электронная библиотека. – Москва: НЭБ, 2000. – Режим доступа: elibrary.ru. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- SpringerLink [Электронный ресурс]: [база данных]. – Switzerland: SpringerNature, 1842. – Режим доступа: link.springer.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ScienceDirect [Электронный ресурс]: коллекция электронных книг издательства Elsevier. – Netherlands: Elsevier, 2018. – Режим доступа: sciencedirect.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ЭБС «Лань» (права принадлежат ООО «ЭБС ЛАНЬ»), договор № 410 от 19.04.2021 г. с 07.05.2021. по 06.05.2022 (по адресу <http://www.e.lanbook.com>) включает в себя полнотекстовые электронные версии всех книг, вышедших в издательстве, а также коллекции полнотекстовых файлов других издательств. В базе представлены не только учебные издания, но и научная литература, а также словари.
- ЭБС «IPRbooks» (права принадлежат ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа»), договор № 620 от 15.06.2021 г. с 01.08.2021 по 01.08.2022 (по адресу <http://www.iprbookshop.ru>) - содержит учебники и учебные пособия, монографии, производственно-практические, справочные издания, а также деловую литературу для практикующих специалистов. В ЭБС включены издания за последние 5 лет по гуманитарным, социальным и экономическим наукам, по остальным отраслям знания - за последние 10 лет.

8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	Windows: WinPro 10 RUS Upgrd OLP NL Acdmc	договор № 757 от 04.07.2018, срок действия – бессрочно; контракт № 1653 от 14.12.2018, срок действия – бессрочно
2	Office Standard: Office Stdandard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition	договор № 690 от 19.05.2015, срок действия – бессрочно

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

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А-215	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
2	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А-306	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
3	НИЛ «Функциональные гетероциклические соединения» Лаборатория органической химии. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. А-203	Доска меловая, стол письменный, шкаф лабораторный для посуды, стеллаж металлический, мешалка магнитная ММ-5, колбонагреватель ЕС-4110, электроплита, плитки электрические, сушильный шкаф ПЭ-4610, стол-мойка двойная 1200/600/850, поляриметр круговой СМ-3, рефрактометр ИРФ-454 Б-2м, рефрактометр RL3, штативы лабораторные ШЛБ, шкафы вытяжные, стол островной, стол приборный, мойка 60*80 SAFA левая, комплект моделей кристаллических решеток, компрессор, штатив для пипеток, табуреты лабораторные, химическая посуда
4	Лаборатория «Биохимии клетки и метаболитики» Учебная аудитория для проведения лабораторных работ А-209	Столы лабораторные, мойка 60*80 SAFA левая, стол приборный, шкаф вытяжной 1500 ШВ керамика, морозильная камера Binder, бокс микробиологической безопасности БМБ-II- "Ламинар-С."-1,5, тумба

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
		подкатная, сосуд Дьюара для длит. хранения СДС-35М, с 6 канистрами, блок внешний SRC 45 ZSPR-S Mitsubishi Heavy, блок внутренний SRK 45 ZSPR-S Mitsubishi Heavy, бокс для стерильных работ модель UVT-S (-AR) BS-040107-AAA, датчик O2 + плата управления (4-20мА) binder 5002-0060, источник питания PowerPac Basic, 100-120/220-240 V BioRad 1645050, камера Mini-Sub Cell GT, 7х7см,с заливочным столиком и упорами для заливки BioRad, микроцентрифуга лабораторная Epp MS MiniSpin, вариант приспособления MiniSpin, платформа BS-010108-EK P-12/100 12 мест д/колб 100-150мл для шейкера OS-20,OS-10,PSU-10i,ES-20, платформа BS-010116-BK P-16/88 для шейкера для пробирок диаметром 30мм, 88 мест (10мл, 15мл, 50 мл), платформа универсальная BS-010108-AK UP-12 с 3 ограничителями S-10, OS-20, PSU-10i, ES-20, термоциклер для амплификации нуклеиновых кислот T100, трансиллюминатор Квант-С, 20х20 см, длина волны 470 нм, холодильник POZIS RK - 103 А, шейкер термостатируемый ES-20 BS-010111-AAA (27 литров) без платформы, орбита 10 мм, BioSan, электропоратор MicroPulser Electroporator BioRad. термостат TC-1/80 СПУ, стол письменный, табуреты лабораторные, химическая посуда.
54	Помещение для самостоятельной работы студентов. Г-401	Столы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет.