

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

2.1.7.1
(индекс дисциплины)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Структурно-ориентированный молекулярный дизайн
(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	8,25	8,25
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 современном структурно-ориентированном молекулярном дизайне.

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:

- основные методологические подходы, используемые в структурно-ориентированном, лиганд-ориентированном молекулярном моделировании, включая методы получения комбинаторных библиотек (фокусных, диверсифицированных, библиотек молекулярной сложности и др.);
- последовательность и стадии исследования при синтезе заданной структуры физиологически-активного соединения;
- основные методологические подходы используемые при молекулярном моделировании с применением специализированного программного обеспечения;
- основные методологические подходы, используемые в структурно-ориентированном, лиганд-ориентированном молекулярном моделировании, включая методы высокопроизводительного молекулярного докинга, QSAR-анализ и 3D-QSAR.

Уметь:

- на основе данных молекулярного моделирования отобрать привилегированные структуры для дальнейшего синтеза и *in vitro* исследования;
- планировать и осуществлять сложные многостадийные синтетические схемы получения дизайнерских лекарств;
- планировать эксперименты по молекулярному моделированию биологически активных соединений;
- правильно выбирать (отбирать) биологическую мишень и проводить моделирование высокоаффинного лиганда, включая *de novo* дизайн.

Владеть:

- базовыми методами в области мишень- и лиганд ориентированного молекулярного моделирования в приложении к отбору и синтезу новых биологически активных соединений;
- структурно-ориентированным и лиганд-ориентированным подходом для конструирования биологически активного соединения заданной структуры;
- приемами конструирования биологически активных соединений с заданным фармакологическим и токсикологическим профилем (специализированным программным обеспечением, теоретическими моделями);
- основным инструментарием и навыками для осуществления профессиональной деятельности в области молекулярного моделирования.

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	Молекулярное моделирование: Хемоинформатика и молекулярный дизайн.	6	2	-	-	
	Пр 1	Анализ данных для лиганд-ориентированного дизайна БАВ: моделирование «структура-свойство»	6	2	-	-	
	Лаб 1	Компьютерное представление химической информации высокомолекулярных соединений.	6	2	-	-	
	Лек 2	Сущность и препараты полученные методом структурно – ориентированного дизайна.	6	2	-	-	
	Пр 2	Моделирование трехмерной структуры белков	6	2	-	-	
	Лек 3	Молекулярный докинг	6	2	-	-	
	Лаб 2	Молекулярный докинг малых молекул в отношении белка-мишени	6	2	-	-	
	Лек 4	Процедура hit-to-lead оптимизации при разработке лекарственных препаратов	6	2	-	-	

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Ср	Изучение лекционного материала и оригинальной литературы. Подготовка к зачету	6	99,75	-	-	Вопросы к зачету №№ 1-40
	ПА	Промежуточная аттестация	6	0,25		-	Зачет. 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

№ п/п	Вопросы для самостоятельного изучения
1	Основные проблемы поиска новых лекарственных средств и необходимость использования вычислительных методов.
2	Библиотеки химических соединений: Zinc. Библиотеки фрагментов: ASINEX's BioFragments.
3	Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций)
4	Основы двумерного субструктурного поиска.
5	Преимущества трехмерных баз данных перед двумерными.
6	Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомакромолекул.
7	Определение трехмерных фармакофоров и биоизостерных групп.
8	Картография фармакофора.
9	Проблемы расчета трехмерных фармакофоров.
10	Включение дополнительных геометрических особенностей в трехмерный фармакофор
11	Источники данных для трехмерных баз данных

12	Фармакофрные ключи
13	Сущность молекулярного докинга.
14	Основные проблемы и недостатки молекулярного докинга.
15	Функции выигрыша в молекулярном докинге.
16	Понятия о скоринге в молекулярном докинге.
17	Используемые алгоритмы оптимизации в молекулярном докинге.
18	Программы для поиска в трехмерных базах данных. Принципы их работы.
19	Молекулярное подобие и поиск подобия.
20	Типы молекулярных дескрипторов.
21	Программы для расчета молекулярных дескрипторов. Принципы их работы.
22	Молярная рефракция: формулы для расчета, используемые программы.
23	Фармакофрные ключи как молекулярные дескрипторы.
24	Роль и место хемоинформатики в разработке лекарств.
25	Библиотеки химических соединений: Zinc. Библиотеки фрагментов: ASINEX's BioFragments..
26	Фрагментный молекулярный дизайн.
27	Программа MolTech LeadFinder
28	Программа CCDC Gold
29	Программа AutoDock Vina
30	Программа PMV-Dock.
31	Система обработки изображений на Operetta

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	Библиотеки химических соединений
2	Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций)
3	Основы двумерного субструктурного поиска.
4	Преимущества трехмерных баз данных перед двумерными.
5	Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомакромолекул.
6	Определение трехмерных фармакофоров и биоизостерных групп.
7	Картография фармакофора.
8	Проблемы расчета трехмерных фармакофоров.
9	Включение дополнительных геометрических особенностей в трехмерный фармакофор
10	Источники данных для трехмерных баз данных
11	Фармакофрные ключи
12	Сущность молекулярного докинга.
13	Основные проблемы и недостатки молекулярного докинга.
14	Функции выигрыша в молекулярном докинге.
15	Понятия о скоринге в молекулярном докинге.
16	Используемые алгоритмы оптимизации в молекулярном докинге.
17	Программы для поиска в трехмерных базах данных. Принципы их работы.

18	Молекулярное подобие и поиск подобия.
19	Типы молекулярных дескрипторов.
20	Коэффициенты распределения: физический смысл и методы расчеты.
21	Программы для расчета молекулярных дескрипторов. Принципы их работы.
22	Молярная рефракция: формулы для расчета, используемые программы.
23	Топологические индексы и их разновидности.
24	Фармакофорные ключи как молекулярные дескрипторы.
25	Расположение благоприятных позиций молекулярных фрагментов в пределах участка связывания.
26	В чём отличие структурно-ориентированного дизайна от функционально-ориентированного дизайна?
27	Методы структурно-ориентированного молекулярного дизайна
28	Методы структурно-ориентированного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы ВИЧ-1
29	Методы структурно-ориентированного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы EGFR
30	Методы структурно-ориентированного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы PI3K
31	Методы структурно-ориентированного дизайна на примере проектирования ингибиторов сборки тубулина
32	Отбор соединений для QSAR-анализа
33	Получение QSAR-уравнений
34	Перекрестная проверка стабильности в QSAR-анализе
35	Введение в моделирование малых молекул. Данные рентгено-структурного анализа, основные преимущества метода и ограничения. Базы кристаллографических данных. Использование библиотек фрагментов. Преобразование двухмерных координат в трехмерные. Основные форматы файлов для хранения данных о химической структуре. Линейная нотация SMILES.
36	Методы молекулярной механики. Основные отличия молекулярной механики от квантовой, приближение Борна-Оппенгеймера. Использование силовых полей как математических моделей. Оценка вклада связанных атомов: деформация связи, валентных и торсионных углов. Оценка вклада несвязанных атомов: энергия электростатических и ван-дер-Ваальсовых взаимодействий. Аддитивные и поляризуемые силовые поля. Гибридные методы квантовой и молекулярной механики (QM/MM).
37	QSAR моделирование. 1D, 2D QSAR, корреляционные уравнения и линейная регрессия. Требования к данным, используемым в 3D QSAR моделировании. Метод CoMFA. Метод CoMIF. Метод CoMISA.
38	Фармакофорный поиск и анализ. Понятие о фармакофоре. Фармакофорная гипотеза. 2D-отпечатки пальцев. 3D-фармакофоры. Фармакофорный скрининг.
39	Алгоритмы докинга. Постепенное конструирование. Генетические алгоритмы стыковки. Метод табу-поиска. Моделирование отжига.
40	Ковалентный докинг. Понятия об обратимом и необратимом связывании. Нуклеофильно-реактивные аминокислотные остатки. Алгоритмы ковалентного докинга.

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., Зиппл В., Роньян Д., Фолькерс Г.	Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хёльте, В. Зиппл, 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»
2	Кудинов А.Ю, Бунев А.С.	Основы молекулярного моделирования биологически активных веществ: лабораторный практикум/А.Ю. Кудинов, А.С. Бунев. – Тольятти: Изд. ТГУ, 2026. – 168 стр.	Лабораторный практикум	2026	Методический кабинет ЦМХ. Репозиторий ТГУ

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»

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.