

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 26.03.2025 13:42:10
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В. Пекаревский
«__» _____ 2025 г.

Рабочая программа дисциплины
РАЦИОНАЛЬНЫЙ ДИЗАЙН ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Направленность программы магистратуры
Медицинская химия

Квалификация
Магистр

Форма обучения
Очная

Факультет химической и биотехнологии
Кафедра молекулярной биотехнологии

Санкт-Петербург
2025

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
доцент		Ворона С. В.

Рабочая программа дисциплины «Рациональный дизайн лекарственных препаратов»
обсуждена на заседании кафедры молекулярной биотехнологии
протокол от «14» февраля 2025 № 10

Заведующий кафедрой

Д.О. Виноходов

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии
протокол от «20» февраля 2025 № 7

Председатель

М.В. Рутто

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химия»		С.Г. Изотова
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		М.З. Труханович
Начальник учебно-методического управления		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	5
3. Объем дисциплины.	5
4. Содержание дисциплины.	6
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.	6
4.2. Занятия лекционного типа.	6
4.3. Занятия семинарского типа.	8
4.3.1. Семинары, практические занятия.	8
4.3.2. Лабораторные работы.	10
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	10
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.	10
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	10
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	11
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	12
10.1. Информационные технологии.....	12
10.2. Программное обеспечение.	12
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.	12
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.	12
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	13

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ПК-3 Способен проводить обработку и анализ результатов исследований, оценивать их значимость и обосновывать перспективы их применения в области медицинской химии	ПК-3.2 Использование инструментов и методов компьютерного конструирования биологически активных соединений для поиска и создания новых лекарственных препаратов	Знать: основные задачи и методы компьютерного конструирования лекарств; информационные компьютерные системы, хранящие информацию о структуре и биологической активности веществ; Уметь: самостоятельно формулировать задачу по созданию моделей «структура-свойство», пользоваться учебной, научной, научно-популярной литературой, сетью Интернет для решения поставленной задачи; Владеть: навыками использования компьютерных программных продуктов для конструирования лекарств, обработки экспериментальных данных

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Рациональный дизайн лекарственных препаратов» (Б1.В.07) относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, и изучается на 1 курсе во 2 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин бакалавриата, а также дисциплины «Введение в медицинскую химию». Полученные в процессе изучения дисциплины «Рациональный дизайн лекарственных препаратов» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплины «Современные подходы к поиску и разработке новых лекарственных средств», при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	3/108
Контактная работа с преподавателем:	76
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	36(36)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	4
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	32
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Кр
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Зачет

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1	Основы хемоинформатики	6	6	-	6	ПК-3	ПК-3.2
2	Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов	12	8	-	10	ПК-3	ПК-3.2
3	3D-QSAR	6	10	-	6	ПК-3	ПК-3.2
4	Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе структуры мишени	12	12	-	10	ПК-3	ПК-3.2

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	Введение в хемоинформатику. Форматы представления структур химических соединений. Понятия молекулярный граф, молекулярный дескриптор. Линейные нотации. Форматы файлов.	2	ЛВ
1	Алгоритмы поиска по структуре соединений. Базы данных химических, лекарственных и природных соединений.	2	ЛВ
1	Создание моделей связи «структура-свойство». Конструирование лекарств на основе фрагментов структур. Биоизостеризм.	2	ЛВ
2	Компьютерная оценка побочных эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями, АДМЕ, межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества.	2	ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	Заместители: качественные и количественные аспекты взаимосвязи структура –активность.	2	ЛВ
2	Компьютерная оценка фармакологических эффектов. Поиск лекарственных мишеней. Базы данных мишеней лекарственных соединений.	2	ЛВ
2	Компьютерная оптимизация структур лекарственных соединений.	2	ЛВ
2	Компьютерное прогнозирование спектров биологической активности органических соединений: возможности и ограничения.	2	ЛВ
2	Репозиционирование лекарств.	2	ЛВ
3	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур (методы систематического поиска, Монте-Карло и молекулярной динамики). Конформационный анализ.	2	ЛВ
3	Молекулярный электростатический потенциал (МЭП). Поля молекулярного взаимодействия. Поверхности макромолекулы: Ван-дер-Ваальсова поверхность; поверхность, доступная для растворителя; поверхность Коннолли.	2	ЛВ
3	Методы 3D-QSAR. Создание фармакофоров и фармакофорный поиск.	2	ЛВ
4	Структура белка. Методы получения трехмерной структуры белка. PDB. Структура PDB файла.	2	ЛВ
4	Моделирование трехмерной структуры белка. Карта Рамачандрана. Метод моделирования белков по гомологии. Процедуры оптимизации и уточнение моделей.	2	ЛВ
4	Молекулярная динамика. Валидация моделей белков.	2	ЛВ
4	Взаимодействие белок-лиганд.	2	ЛВ
4	Расчет энергии связывания в системе белок-лиганд.	2	ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
4	Виртуальный скрининг. Молекулярный докинг: выбор мишени, подготовка структур мишени и лигандов, обработка результатов.	2	ЛВ

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Иновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку	
1	Рисование структур химических соединений в химическом редакторе Marvin Applet. Конвертация различных форматов представления структур химических соединений.	2	2	КтСм
1	Базы данных PubChem и ChEMBL, DrugBank, Zink, BindingDB, ChemIDplus, ClinicalTrials.gov	2	2	
1	Анализ связи «структура-свойство». Биоизостеризм.	2	2	КтСм
2	Компьютерная оценка токсических эффектов на основе структуры лекарства.	2	2	КтСм
2	Компьютерная оценка адсорбции, распределения, метаболизма, выведения и межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества.	2	2	КтСм
2	Компьютерная оценка фармакологических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарства.	2	2	КтСм

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку	
2	Компьютерное прогнозирование спектров биологической активности органических соединений: возможности и ограничения.	2	2	КтСм
3	Построение моделей низкомолекулярных соединений, поиск конформаций.	2	2	КтСм
3	Создание и поиск фармакофора в базе данных трехмерных структур.	2	2	КтСм
3	Построение 3D-QSAR с CoMFA моделей.	2	2	КтСм
3	Построение и оценка моделей связи «структура-активность». Компьютерная программа GUSAR.	2	2	КтСм
3	Использование KNIME для построения количественных QSAR моделей.	2	2	КтСм
4	Базы данных мишеней лекарственных соединений.	2	2	КтСм
4	Моделирование трехмерной структуры белка методом гомологического моделирования.	2	2	КтСм
4	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina.	2	2	КтСм
4	Моделирование белок-белковых взаимодействий.	2	2	КтСм
4	Исследование связывания лигандов с мутантными белками.	2	2	КтСм
4	Виртуальный скрининг новых активных соединений с использованием комбинации методов (Q)SAR и докинга.	2	2	КтСм

4.3.2. Лабораторные работы.

Не предусмотрены.

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Основы хемоинформатики.	6	Кр
2	Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов.	10	Кр
3	3D-QSAR	6	Кр
4	Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка.	10	Кр

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <https://media.spbti.ru/index.php?lang=ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций. При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу – до 20 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

Вариант № 1
1. Линейное представление структур молекул.
2. Конформация молекул и конформационный поиск.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «зачтено».

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Граник, В. Г. Основы медицинской химии : учебное пособие / В. Г. Граник. – 2-е изд. – Москва : Вузовская книга, 2006. – 383 с.– ISBN 5-9502-0213-9

б) электронные учебные издания:

2. Тарасюк, Е. В. Компьютерное моделирование в химии : учебное пособие / Е. В. Тарасюк, Ю. А. Бессонова. – Магнитогорск : МГТУ им. Г.И. Носова, 2022. – 108 с. – ISBN 978-5-9967-2512-0. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/366041> (дата обращения: 09.12.2024). – Режим доступа: по подписке.

3. Кононова, З. А. Компьютерное моделирование в химии : учебное пособие / З. А. Кононова, С. О. Алтухова. – Липецк : Липецкий ГПУ, 2019. – 145 с. – ISBN 978-5-907168-06-0. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/122414> (дата обращения: 09.12.2024). – Режим доступа: по подписке.

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

Учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <https://media.spbti.ru/index.php?lang=ru>

Электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>

Сайт фундаментальной библиотеки СПбГТИ(ТУ): <http://bibl.lti-gti.ru>

Инструмент молекулярного докинга: <https://mcule.com/apps/1-click-docking/>

Гуреев М.А., Кадочников В.В., Порозов Ю.Б. Молекулярный докинг и его верификация в контексте виртуального скрининга. – Санкт-Петербург: Университет ИТМО, 2018. – 50 с. – Текст : электронный – URL: https://books.ifmo.ru/book/2179/molekulyarnyy_doking_i_ego_verifikaciya_v_kontekste_virtualnogo_skrininga:_uchebnoe_posobie.htm

Введение в хемоинформатику: учеб. пособие. Ч. 1. Компьютерное представление химических структур: учеб. пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек. – Казань, Москва, Страсбург, 2020. – 176 с. – Текст : электронный – URL: <https://i.twirpx.link/file/3620669/>

Введение в хемоинформатику: учеб. пособие. Ч. 2. Химические базы данных / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек. – Казань, Москва, Страсбург, 2020. – 185 с. – Текст : электронный – URL: <https://i.twirpx.link/file/3620670/>

Введение в хемоинформатику: учеб. пособие. Ч. 3. Моделирование «структура-свойство»: учеб. пособие / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек. – Москва, Казань, Страсбург, 2020 – 296 с. – Текст : электронный – URL: <https://i.twirpx.link/file/3620671/>

Введение в хемоинформатику: учеб. пособие. Ч. 4. Методы машинного обучения: учеб. пособие / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек. – Москва, Казань, Страсбург, 2020. – 321 с. – Текст : электронный – URL: <https://i.twirpx.link/file/3620672/>

Введение в хемоинформатику: учеб. пособие. Ч. 6. Химическое пространство и виртуальный скрининг: учеб. пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек. – Казань, Москва, Страсбург, 2020. – 262 с. – Текст : электронный – URL: <https://i.twirpx.link/file/3623608/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Рациональный дизайн лекарственных препаратов» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея знания по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

Microsoft Office (Microsoft Word, Microsoft Excel), RStudio, KNIME, PyMOL, AutoDock.

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

Общие поисковые системы: <https://www.google.com/>, <https://ya.ru/>

Справочно-поисковая система “Chemnet” химического факультета Московского государственного университета: <https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/>

База данных химических молекул и их активности в биологических экспериментах Национального центра биотехнологической информации (NCBI): <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>

База данных биоактивных молекул с лекарственными свойствами ChEMBL: <https://www.ebi.ac.uk/chembl>

База данных лекарственных веществ с химической, фармакологической и фармацевтической информацией DrugBank: <https://go.drugbank.com>

База данных трехмерных структурных данных крупных биологических молекул Protein Data Bank: <https://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.

Для ведения лекционных занятий используется аудитория, оборудованная средствами мультимедийной и оргтехники. Для ведения практических занятий используется компьютерный класс, оборудованный персональными компьютерами, объединенными в сеть.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Рациональный дизайн
лекарственных препаратов»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-3	Способен проводить обработку и анализ результатов исследований, оценивать их значимость и обосновывать перспективы их применения в области медицинской химии	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)
			«зачтено»
ПК-3.2 Использование инструментов и методов компьютерного конструирования биологически активных соединений для поиска и создания новых лекарственных препаратов	Знает основные базы данных с информацией о структуре и биологической активности химических и природных соединений; подходы к определению достаточности данных, необходимых для применения методов компьютерного конструирования лекарств	Правильные ответы на вопросы № 1-20 к зачету	Перечисляет основные базы данных с информацией о структуре и биологической активности химических и природных соединений, ориентируется в подходах к определению достаточности данных, необходимых для применения методов компьютерного конструирования лекарств, может допускать ошибки
	Умеет анализировать имеющиеся данные, необходимые для применения методов компьютерного конструирования лекарств	Правильные ответы на вопросы № 21-30 к зачету	Имеет представление о данных, необходимых для применения методов компьютерного конструирования лекарств, может провести анализ качества и полноты имеющихся данных с подсказкой преподавателя
	Владеет навыками работы с основными базами данных о структуре и биологической активности химических и природных соединений, извлечения данных и определению их достаточности для применения методов компьютерного конструирования лекарств	Правильные ответы на вопросы № 31-40 к зачету	Демонстрирует навыки работы с базами данных о структуре и биологической активности химических и природных соединений, извлечения данных и определению их достаточности, может допускать ошибки

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)
			«зачтено»
	Знает основные задачи и методы компьютерного конструирования лекарств, информационные компьютерные системы, хранящие информацию о структуре и биологической активности веществ	Правильные ответы на вопросы № 41-50 к зачету	Перечисляет основные задачи и методы компьютерного конструирования лекарств, может объяснить принципы использования информационных компьютерных систем, хранящих информацию о структуре и биологической активности веществ, может допускать ошибки
	Умеет анализировать задачи для создания моделей «структура-свойство» и правильно выбирать источники учебной, научной, научно-популярной литературы, сети Интернет для профессиональной деятельности	Правильные ответы на вопросы № 51-60 к зачету	Имеет представление о моделях «структура-свойство», может выбрать источники учебной, научной, научно-популярной литературы, сети Интернет с подсказкой преподавателя
	Владеет навыками работы со стандартными компьютерными программами, используемыми в компьютерном конструировании лекарств (KNIME, AutoDock и другие)	Правильные ответы на вопросы № 61-70 к зачету	Демонстрирует навыки работы со стандартными компьютерными программами, используемыми в компьютерном конструировании лекарств

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.

1. Основная догма хемоинформатики.
2. Представления молекул.
3. Основные идентификаторы химических соединений.
4. Цели компьютерного представления химических структур.
5. Фингерпринты.
6. Сходство химических соединений. Коэффициент Танимото.
7. “Me-too” подход в конструировании лекарств.
8. Что такое (Q)SAR?
9. Понятие о биоизостеризме.
10. Дескрипторы химических соединений.
11. Правило соотношения количества дескрипторов и структур.
12. Показатели точности количественных моделей.
13. Показатели точности классификационных моделей.
14. Влияние заместителей на свойства молекулы.
15. Влияние метильной группы на свойства молекулы.
16. Влияние галогенов на свойства молекулы.
17. Влияние ненасыщенных групп на свойства молекулы.
18. Пролекарства (Prodrug).
19. Молекулярная механика. Силовые поля.
20. Силы Ван-дер-Вальса.
21. Электростатика и частичные атомарные заряды.
22. Конформация молекул и конформационный поиск.
23. Потенциалы молекулярных взаимодействий. Молекулярный электростатический потенциал (МЭП).
24. Поверхности макромолекулы: Ван-дер-Ваальсова поверхность; поверхность, доступная для растворителя; поверхность Коннолли.
25. Аминокислоты, классификация по свойствам, заряд на молекулах, пептидная связь.
26. Классификация методов QSAR/QSPR.
27. Силы, удерживающие структуру белка.
28. Основные вторичные структуры белка.
29. Доменная организация белка, структурная классификация белков.
30. Специфичность, селективность, аффинность, насыщение связывания.
31. Конформационные изменения при связывании. Кинетика связывания белок-лиганд.
32. Время удержания.
33. Какие фильтры используются для подготовки базы данных низкомолекулярных соединений для виртуального скрининга.
34. Какие методы поиска новых соединений включены в понятие виртуального скрининга.
35. Что такое докинг. Два основных расчетных модуля в программах докинга.
36. Что такое оценочная функция. Какие типы оценочных функций существуют. Почему оценочные функции неточные.
37. Источники базовых соединений. Оптимизация лиганда. Какие модификации базовой структуры используют при оптимизации этой структуры.
38. Какие параметры рассчитывают из траектории молекулярной динамики.
39. Какие подходы используют для моделирования белка в водном окружении и для ускорения расчетов молекулярной динамики.
40. Какие компоненты включает энергия Гибса. Как сложно их рассчитывать в системе белок-лиганд.
41. Линейное представление структур молекул.

42. Топологическое представление структур молекул.
43. Формат SMILES, его преимущества и недостатки.
44. MOL формат, его преимущества и недостатки.
45. Формат InChI, его преимущества и недостатки.
46. Формула Маркуша, его преимущества и недостатки.
47. Виды структурного поиска в химических базах данных.
48. База данных PubChem.
49. База данных ChEMBL.
50. База данных DrugBank.
51. База данных ClinicalTrials.gov
52. Методы машинного обучения, используемые для создания QSAR моделей.
53. Валидации QSAR моделей.
54. Предобработка химических структур.
55. Методы отбора дескрипторов.
56. Конструирование лекарств de novo.
57. Конструирование лекарств методом, основанном на фрагментах (Fragment-based drug design).
58. Форматы файлов для молекул. Виды представления 3D-структур молекул. Генерация 3D-структур из 2D.
59. Конформационный анализ. Методы систематического поиска, Монте-Карло и молекулярной динамики.
60. Фармакофорная модель.
61. Модель псевдорцептора.
62. Метод 3D- QSAR. Методы CoMFA, GRID, CoMSIA и CMF.
63. Методы определения 3D-структуры белка.
64. База трехмерных структур макромолекул. Формат файла PDB.
65. Параметры, необходимые для полного описания взаимодействия белок-лиганд.
66. Модели взаимодействия белок-лиганд. Силы, участвующие во взаимодействии белок-лиганд.
67. Какие базы низкомолекулярных соединений используются для виртуального скрининга. Какие преимущества и недостатки у них.
68. Какие типы генерации поз существуют в программах докинга. Как в докинге можно учесть подвижность белка-мишени.
69. На чем основан метод молекулярной динамики.
70. Метод пертурбации свободной энергии.

При сдаче зачета студент получает 2 вопроса из перечня вопросов, время подготовки к устному ответу – до 20 мин.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб ГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.