

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации**

**Аннотация рабочей программы дисциплины  
Б1.В.ДВ.03.01 Физические основы дизайна молекул**

<b>Направление подготовки:</b>	18.03.01 Химическая технология
<b>Профиль подготовки:</b>	Производство готовых лекарственных средств
<b>Форма обучения:</b>	очная

**Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

*Компетенция(и), индикатор(ы) и результаты обучения*

УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач

УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

*Знать:*

УК-1.5/Зн5 Знать методы и методики анализа поставленных задач в области молекулярного дизайна и способы их решения

*Уметь:*

УК-1.5/Ум9 Уметь применять оптимальные методы и методики анализа поставленных задач в области молекулярного дизайна

УК-1.5/Ум10 Уметь применять основные методы и методики анализа и моделирования строения веществ и выбирать способы их решения

**Место дисциплины в структуре ОП**

Дисциплина (модуль) Б1.В.ДВ.03.01 «Физические основы дизайна молекул» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 4.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

- Б1.О.14 Аналитическая химия;
- Б1.В.03 Инженерная графика;
- Б1.О.05 Информатика;
- Б1.О.02 Математика;
- Б1.В.06 Основы автоматизированного проектирования элементов технологического оборудования;
- Б1.О.08 Основы теории вероятности и математической статистики;
- Б1.В.ДВ.02.01 Приложение линейной алгебры для решения технологических задач;

Б1.О.13 Физическая химия;

Б1.В.ДВ.02.02 Численные методы;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.ДВ.06.02 Биотрансформация лекарственных веществ;

Б1.В.ДВ.06.03 Введение в фармакологию;

Б1.О.29 Метрологическое обеспечение фармацевтических производств;

Б1.В.ДВ.03.03 Оптические методы в физической химии;

Б1.О.18 Статистические методы обработки данных с использованием программного обеспечения;

Б1.О.22 Философия;

Б1.В.ДВ.03.02 Цифровые устройства измерения, контроля и управления;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

### **Содержание разделов, тем дисциплины**

#### ***Раздел 1. Введение. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений.***

##### *Тема 1.1. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений.*

Основы квантовой механики. Матричная механика Гейзенберга. Уравнение Шредингера. Операторы импульса, момента импульса, энергии. Матричное представление операторов. Статистический смысл волновой функции. Принцип неопределенности Гейзенберга. Свободное движение частицы. Волны Де Бройля. Представление Дирака.

#### ***Раздел 2. Уравнение Шредингера и его решение для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали.***

##### *Тема 2.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали.*

Уравнение Шредингера и его решение для атома водорода. Атом водорода (разделение переменных). Радиальная часть (полиномы Лагерра). Сферическая часть (шаровые функции, полиномы Лежандра). Квантовые числа. Форма электронных облаков. Спин электрона. Операторы спина. Одноэлектронные спиновые функции. Понятия об электронной орбитали. Спин электрона и уравнение Дирака. Два электрона со спинами. Принцип Паули. Многоэлектронная волновая функция

#### ***Раздел 3. Теория функционала плотности***

##### *Тема 3.1. Теория функционала плотности*

Понятие электронной плотности. Подходы, предшествующие современной теории функционала плотности: методы Томаса-Ферми и Томаса-Ферми-Дирака, метод Слейтера ( $X$ -alpha), расчет обменной энергии однородного электронного газа, вывод уравнений. Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП, DFT). Вспомогательная система невзаимодействующих электронов и вывод уравнений Кона-Шэма. Приближение локальной плотности (LDA). Обменные и корреляционные функционалы. Локальные и градиентно-скорректированные (GGA) функционалы плотности. Иерархия современных методов DFT. Применение DFT для расчетов свойств возбужденных состояний: методы TD-DFT. Внутренние недостатки современных методов (самовзаимодействие электронов, учет дисперсионных взаимодействий) и пути их устранения.

#### **Раздел 4. Практическое применение современных методов квантовой химии**

##### *Тема 4.1. Практическое применение современных методов квантовой химии*

Основные пакеты квантово-химических программ, их возможности. Логическая структура типичных неэмпирических (ab-initio) и DFT- программ расчета электронной структуры и свойств молекулярных систем. Методы оптимизации геометрии молекул. Расчеты поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) и свойств, связанных со строением ППЭ: ИК- и КР-спектров, термодинамических характеристик молекул, активационных барьеров химических реакций. Расчеты электронных спектров поглощения и свойств возбужденных состояний. Достоверность получаемых результатов, средняя точность расчетов.

#### **Раздел 5. Общие принципы молекулярного дизайна.**

##### *Тема 5.1. Общие принципы молекулярного дизайна веществ с заданной биологической активностью*

1. Основные тенденции развития молекулярного дизайна биологически активных соединений. Практическая направленность и фундаментальное значение. Принципиальная схема разработки новых лекарственных средств. Понятие неудовлетворенной медицинской потребности. Понятие терапевтической мишени. Связь терапевтической мишени и биологической активности.

2. Белки как терапевтические мишени. Мишень-направленный поиск лекарственных средств. Методы оценки прочности комплексов белок- лиганд. Использование модельных молекулярно-механических потенциалов для описания энергии образования комплекса. Основные силовые поля, используемые в молекулярном моделировании.

##### *Тема 5.2. Методы молекулярного докинга*

Обзор вычислительных методов молекулярного докинга, его место в современной биологии. Программы и серверы для проведения молекулярного докинга. Предсказание биологической активности методами QSAR. Оценка биологической активности методами молекулярного докинга. Основные классы терапевтических мишеней. Понятие селективности.

#### **Объем дисциплины и виды учебной работы**

##### *Очная форма обучения*

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Практические занятия (часы)	Лекции (часы)	Консультации в период теоретического обучения (часы)	Самостоятельная работа студента (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
Четвертый семестр	108	3	42	24	12	6	64	Зачет (2)
Всего	108	3	42	24	12	6	64	2

**Разработчик(и)**

Научно-образовательный центр биофизических исследований в сфере фармацевтики, доктор физико-математических наук, профессор Циовкин Ю. Ю.