

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

**Аннотация рабочей программы дисциплины
Б1.В.08 Компьютерный дизайн молекул**

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Профиль подготовки:	Медицинская химия и дизайн молекул
Форма обучения:	очная

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

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

ПК-П2 Способен проводить научные исследования по определению связи структуры и активности органических веществ с заданной биологической активностью

ПК-П2.1 Применяет методы молекулярного моделирования для анализа взаимодействия лиганда с молекулярной мишенью

Знать:

ПК-П2.1/Зн2 Знать подходы к компьютерному моделированию лекарственных молекул и понимать различия между ними.

Уметь:

ПК-П2.1/Ум2 Уметь проводить анализ и подготовку структуры мишени и лиганда.

ПК-П2.1/Ум3 Уметь проводить поиск по электронным базам данных белковых молекул и химических соединений.

ПК-П2.1/Ум4 Уметь проводить основные процедуры молекулярного моделирования (моделирование по гомологии, молекулярный докинг, молекулярная динамика) и анализировать их результаты.

ПК-П2.2 Применяет методы QSAR-моделирования для количественного анализа связи структуры и биологической активности

Знать:

ПК-П2.2/Зн1 Знать способы представления химических данных.

Уметь:

ПК-П2.2/Ум2 Уметь использовать дескрипторное представление химического пространства для поиска веществ требуемыми свойствами.

ПК-П2.2/Ум3 Уметь строить простейшие зависимости SAR/QSAR/QSPR.

ПК-П2.2/Ум4 Иметь представление о классических методах машинного обучения (классификация, регрессия).

Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина Б1.В.08 «Компьютерный дизайн молекул» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 2.

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.09 Медицинская химия;

Б3.О.01(Д) Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы;

Б2.В.01(Пд) производственная практика, преддипломная практика;

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, основные подходы к компьютерному дизайну молекул

Тема 1.1. Введение в предмет, основные понятия. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул.

Предмет и задачи дисциплины. Понятие о компьютерном рациональном дизайне молекул. Междисциплинарный подход в компьютерном дизайне молекул. Обзор основных методов, используемых в компьютерном дизайне молекул.

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования.

Тема 2.1. Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Структурная организация белковых молекул (мишеней).

Тема 2.2. Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF).

Специализированные базы данных и ПО, основные форматы файлов (PDB, MOL, SDF). Работа с базами PDB, PubChem.

Тема 2.3. Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов).

Визуализация и анализ структур белковых молекул и малых молекул (лигандов). Работа в PyMOL и Maestro Academic.

Тема 2.4. Выравнивание белковых молекул.

Выравнивание белковых молекул. Работа в PyMOL и Maestro Academic.

Тема 2.5. Моделирование по гомологии.

Моделирование по гомологии. Работа с сервисом SWISS-MODEL.

Тема 2.6. Молекулярный докинг.

Молекулярный докинг. Работа с Autodock Vina.

Тема 2.7. Молекулярная динамика.

Молекулярная динамика. Работа с GROMACS.

Тема 2.8. Структура и функции белка-мишени.

Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №1 «Структура и функции белка-мишени».

Тема 2.9. Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга.
Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №3 «Исследование взаимодействия «лиганд-мишень» с помощью молекулярного докинга».

Раздел 3. Основы QSAR-моделирования.

Тема 3.1. Компьютерное представление химических соединений.
Компьютерное представление химических соединений.

Тема 3.2. Понятие дескриптора, их виды.
Понятие дескриптора, их виды.

Тема 3.3. Визуализация данных на Python и библиотеки для работы с химическими данными.
Обсуждение по теме занятия, работа в PyMOL и Maestro Academic.

Тема 3.4. SAR/QSAR/QSPR.
SAR/QSAR/QSPR. Работа с QSARToolbox, QSARDB.

Тема 3.5. Основы машинного обучения.
Основы машинного обучения. Работа с scikit-learn.

Тема 3.6. Поиск веществ с заданными свойствами.
Обсуждение, формулировка проблемы и решение ситуационной задачи №2 «Поиск веществ с заданными свойствами».

Объем дисциплины и виды учебной работы

Очная форма обучения

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Лабораторные занятия (часы)	Консультации в период теоретического обучения (часы)	Консультации в период сессии (часы)	Самостоятельная работа студента (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
Второй семестр	216	6	74	64	8	2	108	Экзамен (34)
Всего	216	6	74	64	8	2	108	34

Разработчик(и)

Кафедра органической химии, кандидат химических наук, доцент Чернов Н. М., кандидат фармацевтических наук, доцент Куваева Е. В.