

**АВТНОМНАЯ НЕКОММЕРЧЕСКАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ
ОРГАНИЗАЦИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»
(АНОО ВО «УНИВЕРСИТЕТ «СИРИУС»)**

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Исследование лекарственных средств

Уровень образования: высшее образование – программа магистратуры

Направление подготовки: 06.04.01 Биология
09.04.03 Прикладная информатика

Направленность (профиль): Биоинформатика

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Исследование лекарственных средств»	Лист 2 Листов 11
-------------------------------	---	---------------------

1. Общая характеристика дисциплины (модуля)

1.1. Цель: освоение современных методов исследования лекарственных средств.

1.2. Задачи: формирование у студентов теоретических знаний и практических навыков, связанных с использованием инструментальных физико-химических методов исследования лекарственных средств и обработкой получаемых с их помощью данных в ходе разработки лекарственных препаратов и при исследовании качества готовых лекарственных форм.

1.3. Общая трудоемкость: 4 з.е.

1.4. Планируемые результаты обучения:

Формируемые компетенции (код компетенции, формулировка)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (индикаторы достижения компетенций)
ПК-1. Способен применять фундаментальные математические и естественнонаучные знания для решения профессиональных задач в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии	ИПК-1.1. Знает фундаментальные основы математики, биологии и других естественных наук
	ИПК-1.2. Применяет фундаментальные знания математики, биологии и других естественных наук для постановки и решения исследовательских и практических задач
	ИПК-1.3. Анализирует современные проблемы в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии, формулирует гипотезы и вырабатывает подходы для решения исследовательских и практических задач
ПК-4. Способен комбинировать и адаптировать информационно-коммуникационные технологии для решения профессиональных задач в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии с учетом требований информационной безопасности	ИПК-4.1. Знает базовые понятия информатики, информации, ее измерения, кодирования и представления в вычислительных системах, а также принципы сбора, хранения и обработки информации
	ИПК-4.2. Использует информационно-коммуникационные технологии для решения профессиональных задач в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии
	ИПК-4.3. Комбинирует и адаптирует информационно-коммуникационные технологии с учетом требований информационной безопасности
ПК-6. Способен самостоятельно проводить расчетные работы и исследования в области биоинформатики, биоинженерии, биотехнологии и фарминдустрии, применяя навыки работы с	ИПК-6.1. Применяет классические методы решения задач, современные программные комплексы и навыки работы с высокотехнологичным лабораторным оборудованием для проведения расчетных работ и исследований
	ИПК-6.2. Проводит расчетные работы и исследования,

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Исследование лекарственных средств»	Лист 3 Листов 11
-------------------------------	---	---------------------

высокотехнологичным лабораторным оборудованием	осуществляет обработку, анализ и интерпретацию биомедицинских и биотехнологических данных
	ИПК-6.3. Оформляет результаты расчетных работ и исследований в соответствии с требованиями к отчетной документации

2. Структура и содержание дисциплины (модуля)

2.1. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной деятельности:

Виды учебной деятельности	3 семестр	Всего
Контактная работа обучающихся с преподавателем, всего ч.	52	52
Лекционные занятия, ч.	24	24
Практические (семинарские) занятия, ч.	24	24
Лабораторные занятия, ч.	х	х
Промежуточная аттестация – экзамен, ч	4	4
Промежуточная аттестация – зачет с оценкой, ч	х	х
Промежуточная аттестация – зачет, ч	х	х
Самостоятельная работа обучающихся, всего ч.	92	92
Общая трудоемкость, ч.	144	144
Общая трудоемкость, з.е.	4	4

2.2. Структура дисциплины (модуля) по разделам (темам) и видам учебной деятельности:

Наименования разделов (тем) дисциплины (модуля)	Лекционные занятия, ч	Практические (семинарские) занятия, ч	Лабораторные занятия, ч	Промежуточная аттестация, ч	Самостоятельная работа, ч	Всего, ч	Форма текущего контроля / промежуточной аттестации
Введение	1	1			2	4	Устный опрос
Раздел 1. Методы исследования пространственной структуры белков и прочих биополимеров	4	4			16	24	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 2. Методы исследования взаимодействий с участием белков	4	4			16	24	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 3. Оптическая спектроскопия	3	3			12	18	Устный опрос, контрольные

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Исследование лекарственных средств»	Лист 4 Листов 11
-------------------------------	---	---------------------

							работы, проектные работы, тестирование
Раздел 4. Спектроскопия ЯМР	4	4			16	24	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 5. Калориметрические методы исследования	3	3			12	18	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 6. Хроматографические методы исследования	2	2			8	12	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 7. Метод поверхностного плазмонного резонанса	1	1			4	6	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Раздел 8. Физико-химические свойства лекарственных препаратов и методы их исследования. Контроль качества лекарственных средств.	2	2			6	10	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование
Промежуточная аттестация				4		4	Экзамен
Итого	23	23	х	4	90	140	

2.3. Содержание разделов (тем) дисциплины (модуля):

Наименования разделов (тем) дисциплины (модуля)	Содержание разделов (тем) дисциплины (модуля)
Введение	Классификация и краткая история развития физико-химических методов исследования. Их роль в исследовании структуры белков, нуклеиновых кислот, прочих биомолекул и взаимодействий между ними. Значение для разработки новых лекарственных средств и анализа готовых лекарственных препаратов. Важность компьютерных методов анализа данных инструментальных исследований.

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Исследование лекарственных средств»	Лист 5 Листов 11
-------------------------------	---	---------------------

Раздел 1. Методы исследования пространственной структуры белков и прочих биополимеров	Рентгеноструктурный анализ. Дифракция на пространственных решетках. Условие Вульфа – Брэгга. Восстановление трехмерной структуры белка по дифракционным данным. Метод малоуглового рентгеновского рассеяния. Криоэлектронная микроскопия – новый конкурент рентгеноструктурного анализа. Обработка данных в методе криоэлектронной микроскопии. Применение методов гомологичного моделирования и алгоритма AlphaFold2 для реконструкции трехмерной структуры белка.
Раздел 2. Методы исследования взаимодействий с участием белков	Применение физико-химических методов для исследования белок-лигандных и белок-белковых взаимодействий в растворах. Связь между константой аффинности и экспериментально определяемыми параметрами. Ферментативная кинетика. Вывод уравнения Михаэлиса-Ментен. Определение кинетических констант методами Лайнуивера-Берка, Вульфа-Хайнса, Иди-Хофсти. Конкурентное, неконкурентное и бесконкурентное ингибирование. Связь между константой ингибирования и концентрацией полумаксимального ингибирования.
Раздел 3. Оптическая спектроскопия	Диапазоны электромагнитного спектра. Электромагнитное излучение и его взаимодействие с молекулами и атомами. Закон Ламберта-Бэра. Атомно-абсорбционная спектроскопия. Электронная (УФ-видимая) спектроскопия. Колебательная (инфракрасная и рамановская) спектроскопия и характеристические колебания функциональных групп. Флуоресцентная спектроскопия. Время жизни флуоресценции. Тушение флуоресценции. Рефрактометрия. Поляриметрия. Спектроскопия кругового дихроизма. Обработка спектральных данных. Фурье-преобразование. Базовые линии. Разделение и характеристика пиков. Работа с библиотеками спектров.
Раздел 4. Спектроскопия ЯМР	Электронный и ядерный спиновые угловые моменты. Условия магнитного резонанса. Химический сдвиг. Спин-спиновые взаимодействия. Расшифровка структуры органических соединений по ЯМР-спектрам. Двумерная ЯМР-спектроскопия (COSY, NOESY). Расшифровка пространственной структуры белков по данным ЯМР.
Раздел 5. Калориметрические методы исследования	Закон охлаждения Ньютона. Изотермическая титрационная калориметрия. Модели связывания и анализ данных калориметрического титрования, определение термодинамических функций связывания. Дифференциальная сканирующая калориметрия. Определение температур и теплот фазовых переходов и реакций. Определение термодинамических параметров денатурации белка. Влияние связывания с лигандами на ДСК-кривые.
Раздел 6. Хроматографические методы исследования	Объем удерживания, мертвый объем, время удерживания. Селективность и эффективность хроматографического разделения, теоретические тарелки. Кинетическая теория хроматографии, уравнение Ван-Деемтера. Применения хроматографии: качественный и количественный анализ, секвенирование белков. Разновидности хроматографических

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Исследование лекарственных средств»	Лист 6 Листов 11
-------------------------------	---	---------------------

	методов: тонкослойная, жидкостная, газовая хроматография, хромато-масс-спектрометрия.
Раздел 7. Метод поверхностного плазмонного резонанса	Закон дисперсии поверхностных плазмонов. Кинетические модели, описывающие взаимодействия на поверхности. Определение констант скорости и равновесия связывания. Устройство сенсоров. Адсорбционная и ковалентная иммобилизация. Метод биослойной интерферометрии.
Раздел 8. Физико-химические свойства лекарственных препаратов и методы их исследования. Контроль качества лекарственных средств.	Состав лекарственных препаратов и основные методы их исследования. Стандартные тесты фармацевтических материалов и готовых лекарственных препаратов. Анализ лекарств в биологических жидкостях. Методы пробоподготовки. Титриметрия. Потенциометрическое титрование. Кислотно-основное и окислительно-восстановительное титрование. Вольтамперометрия. Термогравиметрический анализ. Определение растворимости.

2.4. Самостоятельная работа

Самостоятельная работа предусматривает: самостоятельное изучение теоретического материала, подготовку к ответам на семинарских заданиях, подготовку к текущему контролю и промежуточной аттестации, выполнение тестовых заданий по пройденным темам курса.

3. Текущий контроль и промежуточная аттестация по дисциплине (модулю). Оценочные материалы

3.1. Текущий контроль успеваемости проводится в течение семестра в следующих формах:

Наименования разделов (тем) дисциплины (модуля)	Форма текущего контроля	Оценочные материалы
Введение	Устный опрос	Перечень вопросов для опроса
Раздел 1. Методы исследования пространственной структуры белков и прочих биополимеров	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 2. Методы исследования взаимодействий с участием белков	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 3. Оптическая спектроскопия	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов,

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Исследование лекарственных средств»	Лист 7 Листов 11
-------------------------------	---	---------------------

		перечень вопросов для тестирования
Раздел 4. Спектроскопия ЯМР	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 5. Калориметрические методы исследования	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 6. Хроматографические методы исследования	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 7. Метод поверхностного плазмонного резонанса	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования
Раздел 8. Физико-химические свойства лекарственных препаратов и методы их исследования. Контроль качества лекарственных средств.	Устный опрос, контрольные работы, проектные работы, тестирование	Перечень вопросов для опроса, комплект практических заданий, темы для выполнения проектов, перечень вопросов для тестирования

3.2. Оценочные материалы для текущего контроля

Примерный перечень вопросов для устного опроса:

Какие виды спектроскопических методов вам известны?

Какие количественные параметры используются для характеристики спектральных линий?

Объясните принцип и области применения метода дифференциальной сканирующей калориметрии.

Что такое химический сдвиг?

На каком физическом явлении основан метод спектроскопии кругового дихроизма?

Примерный перечень заданий для контрольных работ:

1. Постройте калибровочный график по экспериментальным данным УФ-спектроскопии и определите концентрацию в неизвестном образце.
2. Определите параметры связывания (константа связывания, энтальпия и стехиометрия) по экспериментальным данным изотермической титрационной калориметрии.
3. Постройте кривую титрования ибупрофена раствором щелочи.

Примерный перечень тем групповых и индивидуальных проектов:

1. Анализ вторичной структуры белка в растворе по данным спектроскопии кругового дихроизма с помощью методов машинного обучения.
2. Разработка метода разделения пиков на хроматограмме на основе математической модели.
3. Разработка алгоритма автоматического анализа калориметрических данных.

Примерный перечень тестовых заданий:

1. Переведите УФ-диапазон 200-800 нм в единицы [см⁻¹].
2. Какие величины могут являться мерами прочности комплексов белок-лиганд?
3. Какие из перечисленных параметров хроматографического пика зависят от концентрации вещества: площадь пика, время удерживания, объем удерживания, высота пика, ширина пика на полувысоте, исправленное время удерживания?
4. Как рабочая частота спектрометра влияет на вид ЯМР спектров?

3.3. Формой промежуточной аттестации является экзамен.

Результаты промежуточной аттестации оцениваются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно».

Оценка «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означает успешное прохождение промежуточной аттестации.

3.4. Оценочные материалы для промежуточной аттестации

Перечень вопросов для подготовки к экзамену:

1. Классификация физико-химических методов исследования.
2. Рентгеноструктурный анализ.
3. Условие Вульфа – Брэгга.
4. Восстановление трехмерной структуры белка по дифракционным данным.
5. Метод малоуглового рентгеновского рассеяния.
6. Криоэлектронная микроскопия.

7. Применение методов гомологичного моделирования и алгоритма AlphaFold2 для реконструкции трехмерной структуры белка.
8. Применение физико-химических методов для исследования белок-лигандных и белок-белковых взаимодействий в растворах.
9. Вывод уравнения Михаэлиса-Ментен.
10. Определение кинетических констант методами Лайнуивера-Берка, Вульфа-Хайнса, Иди-Хофсти.
11. Конкурентное, неконкурентное и бесконкурентное ингибирование.
12. Связь между константой ингибирования и концентрацией полумаксимального ингибирования.
13. Электромагнитное излучение и его взаимодействие с молекулами и атомами.
14. Закон Ламберта-Бэра.
15. Атомно-абсорбционная спектроскопия.
16. Электронная (УФ-видимая) спектроскопия.
17. Колебательная (инфракрасная и рамановская) спектроскопия и характеристические колебания функциональных групп.
18. Флуоресцентная спектроскопия.
19. Тушение флуоресценции.
20. Рефрактометрия.
21. Поляриметрия.
22. Спектроскопия кругового дихроизма.
23. Химический сдвиг.
24. Спин-спиновые взаимодействия.
25. Расшифровка структуры органических соединений по ЯМР-спектрам.
26. Двумерная ЯМР-спектроскопия (COSY, NOESY).
27. Расшифровка пространственной структуры белков по данным ЯМР.
28. Закон охлаждения Ньютона.
29. Изотермическая титрационная калориметрия.
30. Дифференциальная сканирующая калориметрия.
31. Объем удерживания, мертвый объем, время удерживания.
32. Селективность и эффективность хроматографического разделения, теоретические тарелки.
33. Кинетическая теория хроматографии, уравнение Ван-Деемтера.
34. Применения хроматографии: качественный и количественный анализ, секвенирование белков.
35. Разновидности хроматографических методов: тонкослойная, жидкостная, газовая хроматография, хромато-масс-спектрометрия.

36. Поверхностный плазмонный резонанс.

37. Метод биослойной интерферометрии.

38. Стандартные тесты фармацевтических материалов и готовых лекарственных препаратов.

39. Анализ лекарств в биологических жидкостях.

40. Титриметрия.

41. Термогравиметрический анализ.

42. Определение растворимости.

4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

4.1. Перечень основной литературы:

1. Бабков, А. В. Химия в медицине : учебник для вузов / А. В. Бабков, О. В. Нестерова ; под редакцией В. А. Попкова. — Москва : Издательство Юрайт, 2025. — 403 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-9916-8279-4.

4.2. Перечень дополнительной литературы:

1. Introduction to Pharmaceutical Chemical Analysis / S. Hansen; S. Pedersen-Vjergaard; K. Rasmussen. John Wiley & Sons Ltd. 2018.

2. Основные методы исследования лекарственных средств: фармацевтических препаратов, лекарственного растительного сырья и лекарственных форм / Т. А. Чечеткина. — М.: Издательство Медицина, 1999. — 127 с. ЭБС ВОЗ.

3. Handbook of Pharmaceutical Analysis / L. Ohannesian; A. J. Streeter. Marcel Dekker. 2002.

4. Фармацевтическая химия. Под редакцией академика РАМН, профессора А.П. АРЗАМАСЦЕВА. Москва 2004.

4.3. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю):

1. <https://collection.asdlib.org/>

4.4. Перечень современных профессиональных баз данных и ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. <https://www.click2drug.org/>

2. <http://www.rcsb.org/>

АНОО ВО «Университет «Сириус»	Рабочая программа дисциплины (модуля) «Исследование лекарственных средств»	Лист 11 Листов 11
-------------------------------	---	----------------------

5. Материально-техническое и программное обеспечение дисциплины (модуля)

5.1. Материально-техническое обеспечение:

<i>Вид аудитории</i>	<i>Технические средства и оборудование</i>
<i>Учебная аудитория для проведения лекционных занятий</i>	Альфа 5.2 - учебная аудитория для проведения учебных занятий, предусмотренных программой магистратуры. Доска магнитно-маркерная поворотная BoardSYS Twist 100x160 ПО-15Ф 1 шт. Флипчарт 70*100 на роликах 1 шт. Стол-кафедра 1 шт. Стол аудиторный 1 шт. Столы-трансформеры Summa GA ученические 40 шт. Стулья на колесах ученические 40 шт. Ноутбук HP 1 шт. Интерактивная панель NexTouch Nextpanel 86” 1 шт. Радиосистема Arthur Forty U-9700C PSC (UHF) в комплекте. Акустическая система Behringer B215D 2 шт. Веб-камера 4К с технологией искусственного интеллекта JazzTel JT-Vintage-4K 1 шт. Комплект электронных презентаций.
<i>Учебная аудитория для проведения практических занятий – Компьютерный класс</i>	Бета 4.1 – учебная аудитория для проведения практических занятий (компьютерный класс). Доска магнитно-маркерная поворотная BoardSYS Twist 100x160 ПО-15Ф 1 шт. Флипчарт 70*100 на роликах 1 шт. Стол преподавателя аудиторный 1 шт. Столы и стулья ученические 42 шт. Компьютеры Lenovo ThinkCentre M920s SFF в комплекте с мониторами PУАМА 27” и периферией – 42 шт. Интерактивная панель NexTouch Nextpanel 86” 1 шт. Радиосистема Arthur Forty U-9700C PSC (UHF) в комплекте. Акустическая система Behringer B215D 2 шт. Веб-камера 4К с технологией искусственного интеллекта JazzTel JT-Vintage-4K 1 шт. Комплект электронных презентаций.

5.2. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе российского производства: не предусмотрено.