Приложение № 4
к образовательной программе высшего образования – программе магистратуры
по направлению подготовки 04.04.01 Химия
(направленность (профиль) «Современные материалы и химические технологии в медицине»)

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

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ
Сертификат: 7835bcdac1c89a3da835a18f6045494f3f404337
Владелец: Некрасова Людмила Андреевна
Действителен: с 08.07.2026 до 08.07.2027

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

«Компьютерное моделирование»

1. Трудоемкость дисциплины (модуля): 4 з.е.

2. Место дисциплины (модуля) в учебном плане:

Часть, формируемая участниками образовательных отношений, «Профессиональной подготовки» – «Дисциплины (модули) специализации (Медицинская химия)» в рамках Блока 1. Дисциплины (модули), реализуется во 2 семестре.

3. Цель дисциплины (модуля): формирование у обучающихся теоретических знаний и практических навыков применения современных вычислительных методов и программных инструментов для рационального дизайна, виртуального скрининга и оптимизации биологически активных соединений в процессе разработки потенциальных лекарственных средств.

4. Задачи дисциплины (модуля):

– изучить фундаментальные принципы молекулярной механики и квантово-химических расчетов применительно к биоорганическим системам;

– сформировать понимание теоретических основ методов молекулярного моделирования и их ограничений;

– освоить принципы построения моделей «структура — активность» (QSAR/QSPR);

– изучить основы хемоинформатики: молекулярные дескрипторы, отпечатки молекул, методы оценки химического сходства;

– освоить методы молекулярного докинга и оценки энергии связывания «лиганд — мишень»;

– изучить подходы виртуального скрининга (структурного и лигандного);

– сформировать навыки фармакофорного моделирования и поиска соединений по фармакофорным гипотезам;

– освоить методы молекулярной динамики для изучения конформационной подвижности и стабильности комплексов;

– изучить методы гомологического моделирования белковых мишеней при отсутствии экспериментальных структур;

– сформировать навыки работы с базами данных химических соединений и биологических мишеней (PDB, ChEMBL, PubChem, ZINC и др.);

– освоить современное программное обеспечение для молекулярного моделирования (AutoDock, Schrödinger, MOE, GROMACS, RDKit и др.);

– развить умение проводить компьютерное предсказание ADMET-свойств и «лекарственноподобности» соединений;

– научить визуализировать и интерпретировать результаты моделирования;

– изучить применение методов машинного обучения и искусственного интеллекта в дизайне лекарств;

– сформировать умение интегрировать результаты компьютерного моделирования с экспериментальными данными;

– развить критическое мышление при оценке достоверности и применимости результатов вычислительных методов.

5. Перечень разделов (тем) дисциплины (модуля) и их краткое содержание:

Наименование раздела (темы) дисциплины (модуля)	Краткое содержание
Раздел 1. Методы компьютерного моделирования в разработке лекарственных препаратов	Общих охват методов вычислительной химии и биологии с примерами и границами применимости.
Раздел 2. Малые молекулы. Основы строения	Теория отталкивания электронных пар. Определение пространственной формы молекулы. Понятия «конформеры», «изомеры» и «таутомеры». Фармакофорный поиск. Распознавание элементов симметрии, умение определять и классифицировать молекулы по точечным группам симметрии. Систематические представления об изомерии как о ключевом аспекте строения органических соединений.
Раздел 3. Малые молекулы. Генерация трехмерных координат	Рисование структурных формул в Marvin JS, сохранение и конвертация структурных формул в разные форматы данных. Преобразование двухмерных структур в трехмерные.
Раздел 4. Малые молекулы. Вычислительные методы оптимизации молекул	Силовые поля, оптимизация геометрии. Квантово-химические методы. Выбор метода расчета. Оценка константы кислотности.
Раздел 5. Малые молекулы. Потенциалы молекулярных взаимодействий	Методы расчета частичных атомных зарядов и молекулярного электростатического потенциала. Индексы реакционной способности малых молекул.
Раздел 6. Малые молекулы: оптимизация, конформационный анализ и оценка константы кислотности	Конформационный анализ, внутреннее вращение и равновесие конформеров. Оценка константы кислотности.
Раздел 7. Моделирование белков. Принципы организации белковых структур	Элементы вторичной структуры белков. Конформационные свойства. Гомологичность белков. Выбор потенциальной биологической мишени, подготовка белка к расчету.
Раздел 8. Виртуальный скрининиг и докинг	Математический аппарат молекулярного докинга. Алгоритмы и протоколы докинга. Оценочные функции. Виды докинга: жесткий, полугибкий, гибкий, ковалентный, пептидный и протеин-протеин докинг. Границы применимости.
Раздел 9. Молекулярный докинг малых молекул в сайт связывания терапевтической биологической мишени	Подготовка лиганда и белка к расчету. Поиск места связывания. Обоснование выбора. Гибкий докинг, выбор оптимальной докинг позиции анализ результатов докинга. Оценка энергии связывания.

Наименование раздела (темы) дисциплины (модуля)	Краткое содержание
	Ковалентный докинг. Типы реакций. Выбор потенциальной биологической мишени. Анализ результатов докинга.
Раздел 10. Моделирование белков	Моделирование белков по гомологии. Фолдинг белков.
Раздел 11. Уточнение модели белков методами молекулярной динамики	Молекулярная динамика белков. Основы молекулярно-динамических симуляций. Особенности метода и границы применимости.
Раздел 12. Фолдинг белка	Фолдинг белковой структуры с использованием разных подходов.
Раздел 13. Уточнение модели белков методами молекулярной динамики	Силовые поля при моделировании белков. Оптимизация геометрии. Учет растворителя. Лиганд-белковые комплексы. Анализ траекторий МД-симуляций. Кластеризация, расчет энергии связывания. Подготовка лиганд-белковых комплексов к расчету. Выбор модели растворителя и условий симуляции.
Раздел 14. Молекулярно-динамические симуляции лиганд-белковых комплексов	Анализ траекторий МД-симуляций, Кластеризация, расчет энергии связывания. Выбор оптимального, энергетически стабильного лиганд-белкового комплекса.
Раздел 15. Основы метадинамики	Подготовка структуры к расчету. Выбор коллективных переменных.
Раздел 16. Протеин-протеин докинг	Особенности метода. Алгоритмы докинга. Подготовка атомно-молекулярных систем. Протеин-протеин докинг. Анализ результатов молекулярного докинга.
Раздел 17. Пептидный докинг	Особенности метода. Границы применимости. Анализ результатов, выбор оптимальной докинг позиции. Проведение докинга, анализ результатов выбор оптимальной докинг позиции.

6. Образовательные результаты освоения дисциплины (модуля):

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
ПК-1. Способен применять знания в области биохимии, органической, коллоидной, косметической и медицинской химии для постановки и решения исследовательских и практических задач, связанных с разработкой лекарственных препаратов на основе малых	ИПК-1.1. Знает фундаментальные основы биохимии, органической, коллоидной, косметической и медицинской химии
	ИПК-1.2. Применяет знания в области биохимии, органической, коллоидной, косметической и медицинской химии для

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции
молекул и коллоидных биоматериалов	постановки и решения исследовательских и практических задач
ПК-2. Способен применять методы органической и коллоидной химии для разработки лекарственных препаратов на основе малых молекул и коллоидных биоматериалов	ИПК-2.2. Собирает, отбирает и использует необходимые данные и эффективно применяет количественные методы их анализа
	ИПК-2.3. Применяет современные методы исследования свойств биологически активных малых молекул и коллоидных биоматериалов
	ИПК-2.4. Применяет современные подходы к дизайну биологически активных малых молекул и коллоидных биоматериалов
ПК-3. Способен использовать современные информационные технологии, в том числе специализированное программное обеспечение, для решения прикладных задач, связанных с разработкой лекарственных препаратов на основе малых молекул и коллоидных биоматериалов	ИПК-3.1. Знает основы моделирования и принципы работы с большими биологическими и медицинскими данными
	ИПК-3.2. Умеет самостоятельно осуществлять обработку и анализ экспериментальных данных с использованием современных информационных технологий
	ИПК-3.3. Использует современные информационные технологии, в том числе специализированное программное обеспечение, при разработке лекарственных препаратов на основе малых молекул и коллоидных биоматериалов