МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Институт фундаментальной медицины и биологии

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Дизайн лекарственных препаратов М0.ДВ.1

Направление подготовки: 020400.68 - Биология
Профиль подготовки: Биоинформатика
Квалификация выпускника: магистр
Форма обучения: очное
Язык обучения: русский

Автор(ы):

Акберова Н.И.

Рецензент(ы):

Фаттахова А.Н.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Алимова Ф. К.
Протокол заседания кафедры No ___ от "____" _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Института фундаментальной медицины и биологии:
Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__г

Регистрационный No 849438814

Казань
2014

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Акберова Н.И. Кафедра биохимии и биотехнологии отделение биологии и биотехнологии , Natasha.Akberova@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Ознакомить магистрантов основам дизайна биологически активных веществ (базовым терминам, понятиям, принципам и, в целом, методологии конструирования и создания лекарственных препаратов)

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М0.ДВ.1 Гуманитарный, социальный и экономический" основной образовательной программы 020400.68 Биология и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Для успешного изучения дисциплины "Дизайн лекарственных препаратов " необходимо знание основ генетики, биохимии, информатики. Дисциплина связана с курсами магистерской программы: "Компьютерные технологии и в биологии. Программирование и математическое моделирование", "Молекулярная динамика биологических макромолекул", "Системная биология". " Вычислительная геномика и протеомика" и др.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1 (общекультурные компетенции)	способен к творчеству (креативность) и системному мышлению
ОК-2 (общекультурные компетенции)	способен к инновационной деятельности
ОК-4 (общекультурные компетенции)	понимает пути развития и перспективы сохранения цивилизации, связь геополитических и биосферных процессов, проявляет активную жизненную позицию, используя профессиональные знания
ОК-5 (общекультурные компетенции)	проявляет инициативу, в том числе в ситуациях риска, способен брать на себя всю полноту ответственности, способен к поиску решений в нестандартных ситуациях
ПК-11 (профессиональные компетенции)	умеет планировать и реализовывать профессиональные мероприятия (в соответствии с целями магистерской программы)
ПК-13 (профессиональные компетенции)	самостоятельно использует современные компьютерные технологии для решения научно-исследовательских и производственно-технологических задач профессиональной деятельности, для сбора и анализа биологической информации

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основы компьютерного дизайна лекарственных препаратов

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

2. должен уметь:

пользоваться молекулярными редакторами и банками данных о структуре и свойствах лекарственных препаратов

3. должен владеть:

основными понятиями и методами компьютерной разработки лекарств

4. должен демонстрировать способность и готовность:

анализировать зависимость биологической активности органических молекул от их строения, раскрыть сущность основных концепций в стратегии синтеза новых веществ и предсказания потенциальной активности молекулярных структур.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Принципы эмпирического конструирования новых лекарственных препаратов	3		0	2	0	реферат
2.	Тема 2. Основы современного компьютерного дизайна лекарственных препаратов	3		0	2	0	контрольная работа
3.	Тема 3. Моделиование взаимодействия лекарств с биомишенями	3		0	4	0	контрольная работа
4.	Тема 4. Молекулярное моделирование докинга лекарственных препаратов с ферментами	3		0	4	0	отчет

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
.	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			0	12	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Принципы эмпирического конструирования новых лекарственных препаратов

практическое занятие (2 часа(ов)):

Работа с молекулярными редакторами Avogadro, ACD/ChemSketch, в онлайн редакторах PubChem и Marvin Molecule: опции построения молекул низкомолекулярных лигандов (потенциальных ингибиторов ферментов), опции оптимизации структуры, форматы сохранения построенных структур.

Тема 2. Основы современного компьютерного дизайна лекарственных препаратов

практическое занятие (2 часа(ов)):

Работа с DrugBank. Знакомство с форматом записей в базах данных лекарственных веществ , поля записей в DrugBank. Знакомство с возможностями поисковой машины DrugBank. Работа с базами данных структур, метаболитов, спектров.Форматы сохранения.

Тема 3. Моделиование взаимодействия лекарств с биомишенями

практическое занятие (4 часа(ов)):

Моделирование молекулярной динамики ингибиторов с ферментами. Получение файлов координат атомов биологических макромолекул из Protein Data Bank, подготовка структур для проведения молекулярной динамики: создание файла топологии, добавление растворителя и ионов, нагревание системы, минимизация энергии системы. Проведение молекулярной динамики с использованием MDWeb/

Тема 4. Молекулярное моделирование докинга лекарственных препаратов с ферментами

практическое занятие (4 часа(ов)):

Работа с программой AutoDock. Проведение докинга низкомолекулярных лигандов в белки и поиск глобального минимума энергии взаимодействия между лигандом и белком. Определения эффективности связывания потенциальных ингибиторов ферментом

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Принципы эмпирического конструирования новых лекарственных препаратов	3		подготовка к реферату	16	реферат
2.	Тема 2. Основы современного компьютерного дизайна лекарственных препаратов	3		подготовка к контрольной работе	12	контрольная работа

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
3.	Тема 3. Моделиование взаимодействия лекарств с биомишенями	3		подготовка к контрольной работе	12	контрольная работа
4.	Тема 4. Молекулярное моделирование докинга лекарственных препаратов с ферментами	3		подготовка к отчету	20	отчет
	Итого				60	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Активные и интерактивные формы проведения занятий составляют более 60% аудиторной нагрузки пр изучении дисциплины "Дизайн лекарственных препаратов ": на практических занятиях магистранты работают с биоинформационными банками данных структцр лекарственных препаратов и белков в онлайн режиме, используют компьютерные программы моделирования структурного взаимодействия лекарственных препаратов с биологическими мишенями

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Принципы эмпирического конструирования новых лекарственных препаратов

реферат , примерные темы:

Презентации по подготовленныv магистрантами рефератам обсуждается на практических занятиях (составляет 4% оценки для зачета)

Тема 2. Основы современного компьютерного дизайна лекарственных препаратов

контрольная работа , примерные вопросы:

Контольная работа проводится на компьютере с использованием молекулярных редактоов. банков структурной информации, программ-визуализаторов, по предсказанию биологических свойств по структуре лиганда (составляет 6% оценки для зачета)

Тема 3. Моделиование взаимодействия лекарств с биомишенями

контрольная работа , примерные вопросы:

Контольная работа проводится на компьютере с использованием банков структурной информации, компьтерных программ по моделированию молекулярных структур, программ-визуализаторов (составляет 10% оценки для зачета)

Тема 4. Молекулярное моделирование докинга лекарственных препаратов с ферментами

отчет , примерные вопросы:

Студент моделирует докинг определенного лекарственного препарата в активной полости фермента (пара лиганд-фермент индивидуальна для каждого студента) с помощью биоинформатических он-лайн серверов, анализирует полученные результаты, визуализирует структуры, составляет научный отчет , готовит презентацию и защищает свой проект. Успешная презентация составляет 80% оценки для зачета

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Примерные темы рефератов:

Основы современного компьютерного дизайна лекарственных препаратов

Виртуальный скрининг на основе знания строения биомишени.

Жёсткий и мягкий докинги потенцильных лекарств с активными сайтами ферментов.

Докинг с активным сайтом рецептора.

Классические подходы к выявлению количественных соотношений структура - активность (QSAR)

понятие о дескрипторах молекулярной структуры

Вопросы для самостоятельной работы:

- Какие существуют программы и серверы для моделирования структуры молекул потенциальных лекарств?

- Какие опции молекулярных редакторов позволяют оптимизировать длину связей и углы между атомами?

- Какую информацию о структуре молекул лекарств содержит DrugBank?

- Как можно "оживить" структуру белков, полученную методами рентгено-структурного анализа?

- Какие возможности представляет онлайн сервер MDWeb?

- Опишите основные этапы проведения докинга лиганда в активно полости биомишени

7.1. Основная литература:

Основная литература:

Хельтье Х.-Д. и др. Молекулярное моделирование: теория и практика/под ред. В. А. Палюлина и Е. В. Радченко; пер. с англ. - М: Бином. Лаборатория знаний, 2009.-318 с.

Pharmacogenomics of Human Drug Transporters : Clinical ImpactsIshikawa, Toshihisa Kim, Richard B. König, Jörg Pages: 441 Publisher: John Wiley & Sons Location: Somerset, NJ, USA Date Published: 03/2013 Language: en eISBN: 9781118353202 pISBN: 9780470927946 http://site.ebrary.com/lib/kazanst/docDetail.action?docID=10674852&adv.x=1&p00=qh1&f00=lccn&p00_up

Methods and Principles in Medicinal Chemistry : Protein-Protein Interactions in Drug Discovery (2nd Edition) Dömling, Alexander Kubinyi, Hugo Mannhold, Raimund Pages: 338 Publisher: John Wiley & Sons Location: Somerset, NJ, USA

Date Published: 01/2013 Language: en eISBN: 9783527648238 pISBN: 9783527331079

http://site.ebrary.com/lib/kazanst/docDetail.action?docID=10653853&adv.x=1&p00=qh1&f00=lccn&p00_up

7.2. Дополнительная литература:

Дополнительная литература:

Братусь А.С., Новожилов А.С., Платонов А.П. ? Динамические системы и модели биологии. - М.: Физматлит, 2010. - Режим доступа: http://e.lanbook.com/view/book/2119

Генетический аппарат клетки/В. В. Семенов, В. С. Харитонов .? Казань : Казанский государственный медицинский университет, 2010 .? 42с.

7.3. Интернет-ресурсы:

AutoDock - http://autodock.scripps.edu/

DrugBank - www.drugbank.ca/

NAMD - Scalable Molecular Dynamics - www.ks.uiuc.edu/Research/namd/

Биохимические основы химии биологически активных веществ: учебное пособие - http://www.knigafund.ru/books/48613

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ

Драг-дизайн: как в современном мире создаются новые лекарства - http://biomolecula.ru/content/15/

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Дизайн лекарственных препаратов" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB,audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудованием имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Занятия проводятся в компьютерном классе, оборудованном мультимедийной техникой и выходом в ИНтернет

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020400.68 "Биология" и магистерской программе Биоинформатика .

Автор(ы):
Акберова Н.И. _____
"__" _____ 201 __ г.

Рецензент(ы):
Фаттахова А.Н. _____
"__" _____ 201 __ г.

ЭЛЕКТРОННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КФУ