

项目式学习在《药物设计》教学改革中的探索与实践

杨钰，付登宇，戴隆海，胡玉梅，彭志红，闵鉴*

湖北大学 生命科学学院，湖北 武汉 430062

DOI: 10.61369/ETR.2025470035

摘要：为应对生物医药产业对创新型研发人才的迫切需求，解决传统《药物设计》课程中的教学问题，本研究实施了基于项目式学习（PBL）的教学改革。改革秉持“学生中心、项目载体、能力导向”理念，将课程知识体系整合于“虚拟靶点识别 – 先导化合物发现与优化 – ADMET 预测 – 项目答辩”的完整项目中。教学实践表明，PBL 模式显著提升了学生的课程参与度、知识综合运用能力及批判性思维，有效弥合了学研鸿沟，为培养高素质药学人才提供了可行路径。

关键词：项目式学习；药物设计；教学改革；创新能力；计算辅助药物设计

Exploration and Practice of Project-Based Learning in the Teaching Reform of "Drug Design"

Yang Yu, Fu Dengyu, Dai Longhai, Hu Yumei, Peng Zhihong, Min Jian*

College of Life Sciences, Hubei University, Wuhan, Hubei 430062

Abstract : To meet the urgent demand for innovative R&D talents in the biopharmaceutical industry and solve the teaching problems in the traditional course "Drug Design", this study implemented a teaching reform based on Project-Based Learning (PBL). Adhering to the concept of "student-centered, project-carrier, and competence-oriented", the reform integrated the curriculum knowledge system into a complete project including "virtual target identification, lead compound discovery and optimization, ADMET prediction, and project defense". Teaching practice shows that the PBL model has significantly improved students' course participation, comprehensive application ability of knowledge and critical thinking, effectively bridged the gap between teaching and research, and provided a feasible path for cultivating high-quality pharmaceutical talents.

Keywords : project-based learning; drug design; teaching reform; innovative ability; computer-aided drug design

引言

《药物设计》是药学、制药工程及相关专业的一门核心课程，课程旨在使学生掌握从靶点发现到先导化合物优化的基本理论与方法，是连接基础药学知识与新药研发实践的关键桥梁^[1]。然而，传统的《药物设计》传统教学模式存在以下局限：首先，理论教学与实践应用严重脱节。学生很少有机会亲身体验如何将这些原理应用于一个真实的药物发现流程中。其次，学生处于被动接受状态，学习主动性和创新性受到抑制。最后，无法有效培养学生的团队协作与沟通能力。而这些能力在现代跨学科的新药研发团队中是至关重要的^[2]。

项目式学习（PBL）作为一种以学生为中心的探究式教学模式，通过让学生在真实、复杂的项目情境中自主探究、协作解决问题，能同步实现知识建构、技能掌握与素养提升^[3]。因此，将 PBL 模式引入《药物设计》课程，对于推动其教学改革，培养具备创新精神和实践能力的高素质药学人才具有重要的理论价值与现实意义^[4]。

一、项目式教学改革的核心理念与设计思路

本次改革确立了“以学生为中心，以项目为载体，以能力为

导向”的核心理念^[5]。在此指导下，实现三大转变：教师角色从“知识传授者”转变为“项目设计者与学习引导者”；课程内容从“教材章节罗列”转变为“项目流程整合”；教学目标从“知识记

通讯作者：闵鉴，jianmin@hubu.edu.cn

致谢：感谢湖北大学校级教学改革研究项目（2023038、2023041、2024032），湖北大学创新创业学院教育改革研究项目（HDCJY2403, HDCJY2409）资助

忆”转向“能力生成”^[6,7]。基于以上理念，我们设计了《药物设计》PBL 教学模式的基本框架：

1. 项目设计：设计一个或多个具有代表性的药物设计项目，例如“基于 EGFR 激酶结构的新型抗肿瘤抑制剂设计”或“针对 SARS-CoV-2 主蛋白酶的口服药物设计”。项目具备真实性、挑战性和完整性。

2. 团队协作：将学生分为4-5人的项目小组，模拟工业界或学术界的研发团队。每个成员承担特定角色，既分工明确，又需紧密协作。

3. 流程驱动：将传统的课程章节内容，重构为一个环环相扣的项目流程，具体包括：①靶点选择与论证→②生物信息学分析→③活性位点分析→④苗头 / 先导化合物的虚拟筛选→⑤分子对接与相互作用分析→⑥先导化合物的优化（基于理化性质、类药性规则）→⑦ ADMET 性质预测与评估→⑧项目总结与答辩。

4. 工具支撑：为学生提供并培训使用主流的计算辅助药物设计软件和在线数据库，如 PDB 蛋白质数据库、PubChem、AutoDock Vina/GOLD（分子对接）、Discovery Studio（学校已购商业版）、AlphaFold、SwissADME 等，确保学生具备完成项目的技术手段。

二、项目式教学改革的实施方案

以一个48学时的《药物设计》课程为例，具体的实施过程如图1所示：

第一阶段：理论铺垫与项目启动（第1-4周，约8学时）

本阶段采用“精讲+导读”模式。由授课教师精炼讲解项目所需核心理论，同步发布项目选题，各小组通过文献调研，提交《项目立项报告》，阐明立题依据、靶点选择理由与研究计划，完成项目初始化^[8]。

第二阶段：探究实践与过程指导（第5-14周，约36学时）

这是 PBL 教学的核心阶段。

1. 靶点识别与结构准备（第5–6周）：小组深入分析靶点生物学功能与疾病关联，从PDB获取或通过AlphaFold等工具构建三维结构模型。

2. 虚拟筛选与先导化合物发现（第7-10周）：学习使用分子对接软件 Discovery Studio，先验证方法的可靠性，再对 ZINC 等小分子数据库进行虚拟筛选，依据打分与相互作用模式初筛苗头化合物。

3. 先导化合物优化与 ADMET 预测（第 11-13 周）：运用生物电子等排等策略对苗头化合物进行结构优化，并利用 SwissADME、PROTOX-II 等工具系统评估优化后化合物的 ADMET 性质，综合评判其成药前景。

4. 过程管理与指导：教师提供关键技术支撑和方向引导，小组需提交《项目进展报告》并进行中期汇报，接受师生共同评议，确保项目稳步推进。

第三阶段：成果整合与评价反思（第15-16周 约4学时）

各小组撰写完整的《药物设计项目研究报告》，进行15分钟

的 PPT 汇报和 10 分钟的问答。PPT 汇报则重点考察其成果展示、逻辑阐述与问题应对能力。

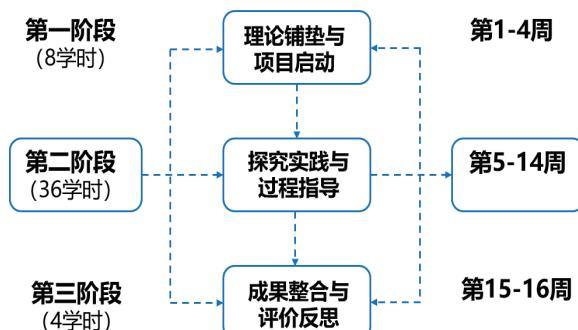


图1《药物设计》项目式教学课程实施流程图

为匹配 PBL 模式，我们建立了侧重过程与能力的多元化评价体系：

最终研究报告（40%）：评估项目科学性、完整性、逻辑性与规范性。

项目答辩表现 (20%)：评估 PPT 制作、表达沟通、团队协作与临场应变能力。

过程性评价(30%):综合《立项报告》、《进展报告》质量、平时参与度及组内互评结果。

个人知识测验 (10%)：通过小型测验保障核心理论掌握，但权重显著降低。

三、结论与展望

经过两轮的教学实践，通过问卷调查、学生访谈和成绩对比分析，改革取得了显著成效：

1. 学习主动性与投入度显著提升，内在驱动力被充分调动。
 2. 知识整合与运用能力增强。学生能够清晰地阐述从靶点到先导化合物的完整逻辑链条，并能将药物化学、生物化学等先修课程的知识有机地融入项目解决方案中，实现了知识的深度融合与迁移应用。
 3. 综合素养得到全面锻炼。在项目完成过程中，学生的信息检索能力、计算工具操作能力、科学逻辑思维、团队协作精神以及书面和口头表达能力均得到了锻炼。一位同学以项目课程中完成的“雌激素受体 PROTAC 药物的结构解析及机制分析”为核心成果，荣获湖北省大学生生命科学竞赛二等奖和全国大学生生命科学竞赛三等奖。

在实践过程中，我们也遇到一些挑战并进行了反思：首先，对教师提出了更高要求，需具备跨学科知识整合能力、项目指导经验及大量的过程管理投入^[9]。其次，教学资源（如正版软件、计算资源）与有限学时之间存在矛盾，需在广度与深度间寻求平衡。再次，学生基础差异可能导致小组贡献不均，需通过精细化分组设计与个性化辅导予以应对^[10]。未来，我们将从三方面深化改革：一是建设更丰富的项目案例库，覆盖多样靶点类型与设计策略；二是推进产教融合，引入企业真实研发课题，增强教学

实战性；三是利用虚拟仿真、在线协作平台等信息技术进行拓展学习。

综上所述，PBL 模式是《药物设计》课程改革的有效方向，对培养适应未来挑战的创新型药学人才具有重要推广价值。

参考文献

- [1] 孙善亮,薛鑫,房方,等.创新型药学人才培养模式下药物设计课程改革探索[J].药学教育,2024,40(06):89-93.DOI:10.16243/j.cnki.32-1352/g4.2024.06.007.
- [2] 徐蓉,侯爱君,刘燕,等.新药科背景下药学人才实践能力培养体系的研究与探索[J].实验室研究与探索,2024,43(03):204-207.DOI:10.19927/j.cnki.syvt.2024.03.039.
- [3] 马蓁,洪兰,戚建平.人工智能赋能药学拔尖创新人才培养体系的探索[J].药学教育,2025,41(05):1-6.DOI:10.16243/j.cnki.32-1352/g4.20250929.001.
- [4] 刘文波,余群英,姜登利,等.《药物设计学》项目式教学改革初探[J].化工时刊,2020,34(01):34-35+58.DOI:10.16597/j.cnki.issn.1002-154x.2020.1.010.
- [5] 杨龙华,单丽红,张恩,等.人工智能在计算机辅助药物设计模块教学中的应用与思考[J].药学教育,2025,41(05):33-36+70.DOI:10.16243/j.cnki.32-1352/g4.2025.05.008.
- [6] 孟青青,李绍顺,孙占奎,等.以案例为核心的情景代入式教学在药物化学课程中的应用[J].药学教育,2024,40(06):58-61.DOI:10.16243/j.cnki.32-1352/g4.2024.06.010.
- [7] 常文强,王小宁.项目式教学在“药学综合实验”教学中的应用[J].教育教学论坛,2023,(26):149-152.
- [8] 上官庆景,阮雪丹,黄丹青.基于模型认知的项目式教学实践研究[J].化学教与学,2023,(11):14-19.
- [9] 王以栋.项目式学习在《药物合成反应》课程教学中的运用研究[J].广东化工,2023,50(19):184-186+205.
- [10] 张丹丹,陈思源,刘慧,等.药物化学课程 CBL 教学中复合型案例的构建[J].药学教育,2021,37(05):49-53.DOI:10.16243/j.cnki.32-1352/g4.2021.05.012.