

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич  
Должность: исполняющий обязанности ректора  
Дата подписания: 10.02.2022 18:15:44  
Уникальный программный ключ:  
4f6042f92f268182537667705646475b93807ac6

## АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.02.02 Молекулярный дизайн биологически активных веществ

Код и наименование направления подготовки, профиля: 33.05.01 Фармация

**Квалификация (степень) выпускника:** Провизор

**Форма обучения:** Очная

**Формируемые компетенции:**

ПК-4 Способен участвовать в мониторинге качества, эффективности и безопасности лекарственных средств и лекарственного растительного сырья, проводит заготовку ЛРС с учетом радио-нального использования ресурсов лекарственных растений.

ИДПК-4.2. Проводит анализ фармацевтических субстанций, вспомогательных веществ и лекарственных форм экстемпорального изготовления и промышленного производства в соответствии со стандартами качества.

**Объем и место дисциплины в структуре ОПОП ВО:**

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений ОПОП ВО, проводится в 5 семестре 3 курса, общая трудоемкость дисциплины – 72 часа / 2 зачётные единицы (з. е.).

**Содержание дисциплины:**

Раздел 1. Основные направления молекулярного дизайна биологически активных веществ (БАВ). Тема 1.1. Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАВ. Подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры. Включает понятия и цели молекулярного дизайна БАВ, подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры. Тема 1.2. Оценка биологической активности программой PASS online (виртуальный скрининг). Изучает оценку биологической активности БАВ программой PASS online. Включает проведение виртуального скрининга программой PASS. Тема 1.3. Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАВ. Включает в себя изучение типов компьютерных программ для квантово-химических расчётов и проведение квантово-химических расчётов в моделировании молекул БАВ. Тема 1.4. Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАВ. Включает в себя изучение компьютерных программ для проведения множественного регрессионного анализа и использование множественного регрессионного анализа в моделировании структур БАВ. Тема 1.5. Построение структур БАВ с заданными свойствами. Правило Липински. В теме рассматривается построение структур БАВ с заданными свойствами и правило Липински. Тема 1.6. Молекулярный докинг программой АК\_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга. Изучается молекулярный докинг программой АК\_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2) и анализ результатов докинга.

**Формы промежуточной аттестации:** Форма промежуточной аттестации: зачёт.