

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич
Должность: исполняющий обязанности ректора
Дата подписания: 22.09.2023 09:05:11
Уникальный программный ключ:
4f6042f92f26818253a667205646475b93807ac6

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Пермская государственная фармацевтическая академия»
Министерство здравоохранения Российской Федерации

Кафедра фармацевтической химии

УТВЕРЖДЕНА
решением кафедры
Протокол от «29» августа 2021г. № 51

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.Б.32 Молекулярный дизайн биологически активных соединений
(индекс, наименование дисциплины (модуля), в соответствии с учебным планом)

Б1.Б.32. МДБАС
(индекс, краткое наименование дисциплины)

19.03.01 Биотехнология
(код, наименование направления подготовки (специальности))

Фармацевтическая биотехнология
(направленность(и) (профиль (и)/специализация(ии))

Бакалавр
(квалификация)

Очная
(форма(ы) обучения)

Год набора - 2022

Пермь, 2021 г.

Авторы–составители:

Профессор кафедры фармацевтической химии д-р фармацевт. наук, доцент К.В. Андрюков

Заведующий кафедрой фармацевтической химии д-р хим. наук, профессор Т.М. Замараева

СОДЕРЖАНИЕ

1.	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2.	Объем и место дисциплины в структуре ОПОП.....	5
3.	Содержание и структура дисциплины.....	5
4.	Фонд оценочных средств по дисциплине.....	8
5.	Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины.....	13
6.	Учебная литература для обучающихся по дисциплине.....	13
7.	Материально-техническая база, информационные технологии, программное обеспечение и информационные справочные системы.....	14

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами ОПОП ВО

Код компетенции	Наименование компетенции	Код индикатора достижения компетенции	Наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
ОПК-2	Способен осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ профессиональной информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий, включая проведение расчетов и моделирование, с учетом основных требований информационной безопасности.	ИДОПК-2.1	Осуществляет поиск, хранение, обработку и анализ профессиональной информации из различных источников и баз данных.	На уровне умений: - Умеет анализировать и сопоставлять представленные точки зрения и позиции специалистов по проблемным темам; - Умеет проводить различные виды патентного поиска по фондам областной патентной библиотеки.
		ИДОПК-2.2	Применяет базовые знания в области информационных, компьютерных и сетевых технологий для представления профессиональной информации в требуемом формате с учетом основных требований информационной безопасности.	На уровне знаний: - Знает специализированные базы данных и программные средства в научной и профессиональной сферах деятельности; - Знает современные компьютерные технологии при сборе и анализе информации научного содержания.
		ИДОПК-2.3	Осуществляет проведение расчетов и моделирование процессов для решения профессиональных задач с помощью информационных, компьютерных и сетевых технологий.	На уровне навыков: - Умеет проводить расчеты и моделирование процессов; - Умеет выбирать современные информационные технологии и программные средства, в том числе отечественного производства, для решения задач профессиональной деятельности.
ПК-1	Способен проводить работы по фармацевтической разработке лекарственных средств.	ИДПК-1.1	Проводит исследования, испытания и экспериментальные работы по фармацевтической разработке.	На уровне умений: - Умеет выбирать наиболее адекватные и эффективные современные методики исследования; - Умеет проводить испытания и экспериментальные работы, связанные с проведением фармацевтической разработки.

		ИДПК-1.2	Разрабатывает новую нормативную документацию на лекарственные средства.	На уровне знаний: - Знает правила разработки нормативной документации; - Знает требования, которые необходимо предъявлять при разработке нормативной документации.
		ИДПК-1.3	Применяет методы статистической обработки полученных результатов исследований, испытаний и экспериментов с использованием современного программного обеспечения.	На уровне навыков: - Умеет применять современные технологии обработки полученных результатов исследований, испытаний и экспериментов; - Умеет пользоваться специализированными программными продуктами статистической обработки.

2. Объем и место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.Б.32. «Молекулярный дизайн биологически активных соединений» относится к базовой части ОПОП, проводится в 6 семестре 3 курса, общая трудоемкость дисциплины – 108 ч. / 3 з. е.

3. Содержание и структура дисциплины

3.1. Структура дисциплины.

№ п/п	Наименование разделов, тем	Объем дисциплины, час.					Форма текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации
		Всего часов	Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий			СР	
			Л	ЛЗ	ПЗ		
Очная форма обучения							
Семестр № 5							
Раздел 1	Основные направления молекулярного дизайна биологически активных соединений (БАС)	88	12	–	40	0	О
Тема 1.1	Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАС. Подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры	8	2	–	4		О
Тема 1.2	Оценка биологической активности программой PASS online (виртуальный скрининг)	8	2	–	4		О
Тема 1.3	Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАС	10	2	–	–		О

№ п/п	Наименование разделов, тем	Объем дисциплины, час.					Форма текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации
		Всего часов	Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий			СР	
			Л	ЛЗ	ПЗ		
Тема 1.4	Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАС	10	2	–	4		О
Тема 1.5	Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка	8	–	–	4		О
Тема 1.6	Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ	8	–	–	4		О
Тема 1.7	Построение структур БАС с заданными свойствами. Правило Липински	10	2	–	4		О
Тема 1.8	Молекулярный докинг. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus)	10	2	–	4		О
Тема 1.9	Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга	8	–	–	4		О
Тема 1.10	Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга	8	–	–	4		О
Раздел 2	Практические аспекты молекулярного дизайна БАС	56	8	–	16	6	О
Тема 2.1	Модели качественного поиска БАС. Способы создания, оценка и валидация	14	2	–	4		О
Тема 2.2	Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация	14	2	–	4		О
Тема 2.3	Способ поиска БАС методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг)	14	2	–	4		О
Тема 2.4	Количественное прогнозирование биологической активности БАС с использованием уравнений множе-	14	2	–	4		О

№ п/п	Наименование разделов, тем	Объем дисциплины, час.					Форма текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации
		Всего часов	Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий			СР	
			Л	ЛЗ	ПЗ		
	ственной регрессии и компьютерных программ						
Промежуточная аттестация		2		2			Зачёт
Всего:		108	20	–	52	36	

Примечание: опрос (О), тестирование (Т).

3.2. Содержание дисциплины.

Раздел 1. Основные направления молекулярного дизайна биологически активных соединений (БАС). Тема 1.1. Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАС. Подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры. Понятия и цели молекулярного дизайна БАС. Подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры. Основы молекулярного дизайна. Цели молекулярного дизайна. Классификация направлений молекулярного дизайна. Требования, предъявляемые к соединению лидеру. Основные положения: молекулярный дизайн; направления молекулярного дизайна; фармакологический скрининг; соединение лидер. Тема 1.2. Оценка биологической активности программой PASS online (виртуальный скрининг). Оценка биологической активности БАС программой PASS online. Проведение виртуального скрининга программой PASS. Определение понятия «виртуальный скрининг». Терапевтическая мишень в онлайн сервисе PASS online. Прогноз спектра биологической активности БАС. Основные положения: виртуальный скрининг; терапевтическая мишень; спектр биологической активности; профиль биологической активности. Тема 1.3. Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАС. Компьютерные программы для проведения квантово-химических расчётов. Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАС. Методы квантово-химического расчёта структур. Квантово-химическое моделирование в анализе БАС. Основные положения: геометрия молекулы; термодинамический дескриптор; частичный заряд атома; полуэмпирический метод PM3. Тема 1.4. Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАС. Компьютерные программы для проведения множественного регрессионного анализа. Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАС. Регрессионный анализ. Основные положения: регрессионный анализ; множественный регрессионный анализ; коэффициент корреляции; коэффициент множественной регрессии.

Тема 1.5. Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка. Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка. Описание структуры с использованием дескрипторов. Способы расчёта структурных дескрипторов. Типы регрессионных зависимостей в исследованиях «структура-свойство». Основные положения: зависимость структура-свойство; структурные дескрипторы; моделирование; множественный регрессионный анализ. Тема 1.6. Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ. Компьютерные программы для расчёта констант липофильности и ионизации. Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации. Физико-химические дескрипторы. Константа липофильности. Влияние констант липофильности и ионизации на биологическую активность БАС. Основные положения: структурные дескрипторы; константа липофильности; константы ионизации. Тема 1.7. Построение структур БАС с заданными свойствами. Правило Липински. Построение структур БАС с заданными свойствами. Основные положения: структурные дескрипторы; константа липофильности; молекуляр-

ная масса; константа кислотности и основности; доноры водородной связи; акцепторы водородной связи. Тема 1.8. Молекулярный докинг. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus). Молекулярный докинг. Понятие и определение. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2. Докинг «родного» лиганда по гидролаза E.Coli(S.Aureus). Основные положения: молекулярный докинг; скоринговые функции; энергия связывания; межмолекулярная энергия.

Тема 1.9. Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга. Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга. Использование ферментов в молекулярном докинге. Основные положения: молекулярный докинг; скоринговые функции; энергия связывания; межмолекулярная энергия; константа ингибирования. Тема 1.10. Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга. Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга. Основные положения: молекулярный докинг; скоринговые функции; энергия связывания; межмолекулярная энергия; константа ингибирования.

Раздел 2. Практические аспекты молекулярного дизайна БАС. Тема 2.1. Модели качественного поиска БАС. Способы создания, оценка и валидация. Содержание темы: Модели качественного поиска БАС. Способы создания. Оценка и валидация моделей качественного поиска БАС. Качественный поиск БАС. Основные положения: качественный поиск; фрагментарные дескрипторы; молекулярный докинг; скоринговые функции; биологическая активность. Тема 2.2. Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация. Поиск количественных соотношений структура-активность. Оценка и валидация моделей количественного поиска БАС. Зависимость «структура-активность». Дескрипторы используемые для описания структуры. Способы расчёта структурных дескрипторов. Типы регрессионных зависимостей в исследованиях «структура-активность». Основные положения: зависимость структура-активность; биологическая активность; структурные дескрипторы; моделирование; множественный регрессионный анализ. Тема 2.3. Способ поиска БАС методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг). Способ поиска БАС методом молекулярного докинга. Использование молекулярного докинга в виртуальном скрининге. Биологическая активность. Виртуальный скрининг. Основные положения: фрагментарные дескрипторы; биологическая активность; молекулярный докинг; скоринговые функции; константы ионизации; константа липофильности. Тема 2.4. Количественное прогнозирование биологической активности БАС с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ. Методы количественного прогнозирования биологической активности БАС. Прогнозирование биологической активности БАС с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ. Основные положения: фрагментарные дескрипторы; биологическая активность; молекулярный докинг; скоринговые функции; константы ионизации; константа липофильности.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1.1. В ходе реализации дисциплины используется следующая форма текущего контроля успеваемости обучающихся: опрос.

4.1.2. Оценочные средства текущего контроля успеваемости

Опрос (по теме 1.1. Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАС)

1. Что лежит в основе молекулярного дизайна?

2. Приведите классификацию направлений молекулярного дизайна.

3. Что такое структурно-ориентированный дизайн?
4. Дайте определение функционально-ориентированного дизайна?
5. Что такое соединение лидер?
6. Дайте определение понятию «молекулярный дизайн БАС».
7. Опишите принцип отбора соединений в ряды.
8. Какие преимущества даёт дизайн БАС с использованием гомологических рядов?
9. Какие вы знаете направления молекулярного дизайна?
10. В чем состоит цель распределения соединений в гомологические ряды?
11. С какой целью проводят исследования оценки влияния изменения заместителей в структуре молекулы?
12. В чём отличие структурно-ориентированного дизайна от функционально-ориентированного дизайна?
13. Как можно использовать функционально-ориентированный дизайн в поиске соединения-лидера?
14. Объясните цели молекулярного дизайна.
15. В чём заключается основной смысл использования соединений-лидеров в поиске БАС?

4.1.3. Шкала оценивания для текущего контроля.

Опрос:

Оценка «отлично» - обучающийся проявляет всестороннее и глубокое знание материала в объёме утвержденной программы дисциплины, дает полные и правильные ответы на вопросы, материал излагает последовательно и грамотно. Демонстрирует осознанный подход к изучению дисциплины, т.е. правильно характеризует структурные свойства, обосновывает предлагаемые методы молекулярного дизайна биологически активных веществ.

Оценка «хорошо» - обучающийся проявляет знание всего изученного программного материала, даёт правильные ответы на вопросы. Материал излагает последовательно и грамотно, обосновывает все положения своего ответа. При ответе допускает небольшие неточности и единичные ошибки, которые оперативно и самостоятельно исправляет при уточняющих вопросах преподавателя.

Оценка «удовлетворительно» - обучающийся проявляет знание основного программного материала, допускает ошибки и неточности при ответе на теоретические вопросы, ошибки исправляет по указанию преподавателя, отвечает на дополнительно заданные вопросы.

Оценка «неудовлетворительно» - обучающийся проявляет незнание основного программного материала, имеет существенные пробелы в изучении отдельных принципиальных вопросов, при ответе на теоретические вопросы допускает существенные ошибки, которые не может исправить даже по указанию преподавателя, на дополнительные вопросы не отвечает.

4.2. Формы и материалы промежуточной аттестации.

4.2.1. Промежуточная аттестация проводится в форме: зачёт.

4.2.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации.

Тест:

Вариант 1

№ п/п	Задание	Правильный ответ	Компетенция, индикатор
1.	Молекулярный дизайн БАС это:	с. Конструирование	ОПК-1,

	a. Молекулярный докинг веществ с ферментом b. Прогнозирование констант липофильности c. Конструирование новых химических соединений с заданными свойствами d. Исследование биологической активности	новых химических соединений с заданными свойствами	ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
2.	Цель молекулярного дизайна БАС: a. Построение структуры с заданными свойствами b. Поиск ингибиторов ДНК c. Корреляционный анализ d. Квантово-химические расчёты	a. Построение структуры с заданными свойствами	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
3.	Структурно-ориентированный дизайн заключается в: a. Проведении квантово-химических расчётов b. Молекулярном докинге c. Исследовании биологической активности d. Создании множества разнообразных новых и экзотических молекулярных структур	d. Создании множества разнообразных новых и экзотических молекулярных структур	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
4.	Стратегия молекулярного дизайна предполагает: a. Измерение констант ионизации b. Глубокое понимание поставленной задачи, изучение молекулярных механизмов целевой функции вещества c. Изучение гидрофобных фрагментов d. Регрессионный анализ	b. Глубокое понимание поставленной задачи, изучение молекулярных механизмов целевой функции вещества	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
5.	К терапевтическим мишеням при дизайне БАС с противовоспалительной активностью относятся: a. Ферменты циклооксигеназа 1 и 2 b. Анальгетическая активность c. Коагуляция молекулы белка d. Ионизированная карбоксильная группа	a. Ферменты циклооксигеназа 1 и 2	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
6.	Прогноз спектра биологической активности в онлайн сервисе PASS online используется для: a. Квантово-химических расчётов b. Биологических испытаний БАС c. Построения структур соединений d. Поиска БАС	d. Поиска БАС	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
7.	Виртуальный скрининг это: a. Испытание биологической активности b. Теоретический метод отбора перспективных БАС с использованием компьютерных программ c. Построение гомологических рядов БАС d. Способ построения структур БАС	b. Теоретический метод отбора перспективных БАС с использованием компьютерных программ	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
8.	Какой из приведенных методов квантово-химического расчёта структур БАС относится к полуэмпирическим: a. Метод Хартри-Фока (HF) b. Метод функционала плотности (DFT) c. Метод Parametrison 3 (PM3)	c. Метод Parametrison 3 (PM3)	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4

	d. Метод молекулярной механики		
9.	Квантово-химические расчёты проводят с использованием программы: a. Gaussian 03 b. Microsoft Word c. Microsoft Excel d. WordPad	a. Gaussian 03	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
10.	Какой из приведенных методов расчёта относится к квантово-химическим: a. Полуэмпирический метод b. Метод молекулярного докинга c. Структурный метод d. Фрагментарный метод	a. Полуэмпирический метод	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
11.	Регрессионный анализ это – _____.	статистический метод оценки влияния одной или нескольких независимых переменных	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
12.	Множественный линейный регрессионный анализ это – _____.	метод установления зависимости одной переменной от двух или более независимых переменных	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
13.	Коэффициент корреляции (R) показывает – _____.	зависимость (корреляцию) двух переменных друг от друга	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
14.	Структурные дескрипторы, основанные на методах квантовой химии – _____.	Квантово -химические	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
15.	Способ расчёта структурных дескрипторов БАС с использованием квантово-химических программ – _____.	Квантово-химический	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
16.	С помощью какого критерия проводят оценку моделей «структура-свойство» и «структура-активность» – _____.	Коэффициент корреляции (R)	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
17.	С использованием каких компьютерных программ можно проводить расчёт констант липофильности (logP) БАС – _____.	ChemOffice и ACD ChemSketch	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
18.	Молекулярная стыковка (докинг) БАС – _____.	это метод молекулярного моделирования стыковки, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной моле-	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4

		кулы по отношению к другой	
19.	Дайте определение понятию «активный центр» фермента – _____.	это место на его поверхности или активный участок, где происходит связывание и каталитическое превращение субстрата	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4
20.	В основе молекулярного дизайна БАС лежит – _____.	дизайн БАС с определенным видом биологической активности	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4

4.2.3 Шкала оценивания.

Решение тестовых заданий оценивается в категориях «зачтено - не зачтено». Тест считается выполненным на оценку «зачтено» при правильном решении более 70 % тестовых заданий.

4.3. Соответствие оценочных средств промежуточной аттестации по дисциплине формируемым компетенциям

Код компетенции	Код индикатора достижения компетенции	Оценочные средства промежуточной аттестации
		Тестирование
ОПК-2	ИДОПК-2.1	+
	ИДОПК-2.2	+
	ИДОПК-2.3	+
ПК-1	ИДПК-1.1	+
	ИДПК-1.2	+
	ИДПК-1.3	+

4.2.3. Критерии оценки сформированности компетенций в рамках промежуточной аттестации по дисциплине

Код компетенции	Код индикатора достижения компетенции	Структурные элементы оценочных средств	Критерии оценки сформированности компетенции	
			не сформирована	сформирована
ОПК-2	ИДОПК-2.1	Тест	Дан правильный ответ менее чем 70% правильных ответов на тестовые задания. Допускает ошибки принципиального характера. Задания, на которые дан неправильный ответ, отражают как минимум один или более заявленных индикаторов компетенций	Дан правильный ответ более чем на 70% правильных ответов на тестовые задания, в которых проверяются все заявленные индикаторы компетенций
	ИДОПК-2.2			
	ИДОПК-2.3			
ПК-1	ИДПК-1.1			
	ИДПК-1.2			
	ИДПК-1.3			

Компетенция считается сформированной на уровне требований к дисциплине в соответствии с образовательной программой, если по итогам применения оценочных средств или их отдельных

элементов результаты, демонстрируемые обучающимся, отвечают критерию сформированности компетенции.

5. Методические материалы по освоению дисциплины

Методические материалы для обучающихся на дисциплине Б1.Б.32. «Молекулярный дизайн биологически активных соединений». Полный комплект методических материалов находится на кафедре фармацевтической химии.

6. Учебная литература для обучающихся по дисциплине

6.1. Основная литература.

1. Тюкавкина Н.А., Бауков Ю.И. Биоорганическая химия. Учебник для ВУЗов 4-е изд. - М.: Дрофа, 2005. - 544 с.
2. Грандберг И. И. Органическая химия: Учебник/ И. И. Грандберг. - 5-е изд., стереотип.. - М.: Дрофа, 2002. - 672 с.

6.2. Дополнительная литература.

1. Невоструев, Валерьян Антонович. Теоретические основы спектральных методов в химии: учеб. пособие / В.А.Невоструев.-2006. - 70 с.
2. Невоструев, Валериан Антонович. Теоретические основы спектральных методов в химии : учеб. пособие / В. А. Невоструев ; Кемеровский гос. ун-т, Кафедра аналитической химии .- Кемерово , 2006 .- 1 эл. гиб. диск : рис., табл.
3. Луцкекина С.В., Варфоломеев С.Д., Балабаев Н.К. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Издательство: ЛИБРОКОМ, 2009. – 581с.
4. Хельтзе Х.-Д., Зиппл В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование: теория и практика / - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 318с.
5. Гаевый М.Д., Петров В.И., Гаева Л.М. Фармакология: Учебник для вузов/ Под ред. проф. В.И.Петрова – М.: ИКЦ «МарТ», 2008. – 560 с.
6. Leach A.R. Molecular modeling: principles and applications. 2nd edition. 2001. Pearson Education Limited.
7. Seydel J.K., Wiese M. Drug-membrane interactions: analysis, drug distribution, modeling. 2002. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
8. Стьюпер Э. Машинный анализ связи химической структуры и биологической активности. М.: Мир, 1986.
9. Раевский О.А. // Рос. хим. журн. 1995. № 39. С. 109–120.
10. Раевский О.А. // Успехи химии. 1999. Т. 68. № 6. С. 555–575.
11. Раевский О.А. // Успехи химии. 1988. Т. LVII. № 9. С. 1565–1585.
12. Раевский О.А., Авидон В.В., Новиков В.П. //Хим.-фарм. журнал. 1982. Т. 16. С. 968–971.
13. Раевский О.А., Новиков В.П. // Хим.-фарм. журнал. 1982. Т. 16. С. 583– 586.
14. Набавич В.М., Дмитриков В.П. // Успехи химии. 1993. Т. 62. Вып. 1. С. 27–39.
15. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиоров Н.С. // Успехи химии. 1988. Т. 57. Вып. 3. С. 337–365.

7. Материально-техническая база, информационные технологии, программное обеспечение и информационные справочные системы

Для проведения занятий используются специальные помещения: учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа. Специальные помещения укомплекто-

ваны специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

В процессе освоения ОПОП используется оборудование:

- Компьютеры с операционной системой Windows XP и выше, имеющие выход в интернет, размер оперативной памяти компьютеров не менее 1000 МВ (мегабайт(1 гигабайт)).
- Проекционное оборудование.
- Динамики, микрофон.

Программное обеспечение

Компьютерные программы:

- Программа рисования химических структур ChemAxon (или аналог).
- Программы для выполнения регрессионного анализа и построения уравнений регрессии: MS Excel и Statistica.
- Программа для подготовки структур макромолекул к вычислительному эксперименту Build-Model, ChemAxon (или аналог).
- Программа для квантово-химических расчётов CambridgeSoft ChemOffice 2010 (или аналог).
- Программа для молекулярного докинга AutoDock (или аналог).
- Программа для визуального анализа результатов докинга VMD (или аналог).

Программы, разработанные на кафедре фармацевтической химии ФОО ПГФА:

- Программа для прогнозирования физико-химических дескрипторов и фармакокинетических параметров АК_QSAR (logP pKa pKb).
- Программы молекулярного докинга: АК_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2) и АК_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)).
- Программы качественного и количественного прогноза биологической активности: АК_QSAR (противовоспалительная активность), АК_QSAR (Анальгетическая активность) и АК_QSAR (противомикробная активность).

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.Б.32. Молекулярный дизайн биологически активных соединений

Код и наименование направления подготовки, профиля: 19.03.01 Биотехнология. Фармацевтическая биотехнология.

Квалификация (степень) выпускника: бакалавр.

Форма обучения: очная.

Формируемая (ые) компетенция (и):

ОПК-2 – способен осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ профессиональной информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий, включая проведение расчетов и моделирование, с учетом основных требований информационной безопасности.

ИДОПК-2.1 – осуществляет поиск, хранение, обработку и анализ профессиональной информации из различных источников и баз данных.

ИДОПК-2.2 – применяет базовые знания в области информационных, компьютерных и сетевых технологий для представления профессиональной информации в требуемом формате с учетом основных требований информационной безопасности.

ИДОПК-2.3 – осуществляет проведение расчетов и моделирование процессов для решения профессиональных задач с помощью информационных, компьютерных и сетевых технологий.

ПК-1 – способен проводить работы по фармацевтической разработке лекарственных средств.

ИДПК-1.1 – проводит исследования, испытания и экспериментальные работы по фармацевтической разработке.

ИДПК-1.2 – разрабатывает новую нормативную документацию на лекарственные средства.

ИДПК-1.3 – применяет методы статистической обработки полученных результатов исследований, испытаний и экспериментов с использованием современного программного обеспечения.

Объем и место дисциплины в структуре ОПОП:

Дисциплина относится к обязательной части ОПОП, осваивается на 3 курсе, 6 семестр, в соответствии с учебным планом, общая трудоемкость дисциплины в зачетных единицах составляет 3 з. е. (108 часов).

Содержание дисциплины:

Раздел 1. Основные направления молекулярного дизайна биологически активных соединений (БАС). Тема 1.1. Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАС. 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 БАС программой PASS online. Включает проведение виртуального скрининга программой PASS. Тема 1.3. Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАС. Включает в себя изучение типов компьютерных программ для квантово-химических расчётов и проведение квантово-химических расчётов в моделировании молекул БАС. Тема 1.4. Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАС. Включает в себя изучение компьютерных программ для проведения множественного регрессионного анализа и использование множественного регрессионного анализа в моделировании структур БАС. Тема 1.5. Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка. Изучаются методы построения количественных соотношений «структура-свойство». Тема 1.6. Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ. Рассматривает компьютерные программы для расчёта констант липофильности и ионизации. Тема 1.7. Построение структур БАС с задан-

ными свойствами. Правило Липински. В теме рассматривается построение структур БАС с заданными свойствами и правило Липински. Тема 1.8. Молекулярный докинг. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus). Тема включает в себя молекулярный докинг, понятие и определение и использование для докинга «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus). Тема 1.9. Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга. Изучается молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2) и анализ результатов докинга. Тема 1.10. Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга. Рассматривает молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)2) и анализ результатов докинга. Раздел 2. Практические аспекты молекулярного дизайна БАС. Тема 2.1. Модели качественного поиска БАС. Способы создания, оценка и валидация. В теме изучаются модели качественного поиска БАС, способы их создания, оценка и валидация. Тема 2.2. Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация. Тема изучает модели количественного поиска БАС, способы их создания, оценка и валидация. Тема 2.3. Способ поиска БАС методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг). Рассматривается способ поиска БАС методом молекулярного докинга. Тема 2.4. Количественное прогнозирование биологической активности БАС с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ. Изучаются методы количественного прогнозирования биологической активности БАС.

Форма промежуточной аттестации: зачет.