

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 31.10.2023 13:51:00  
Уникальный программный ключ:  
d56ba45a9b6e5c64a319e2c5ae3bb7cddb840af0

**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 «07» июня 2022 г. № 62

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

Б1.О.32 Молекулярный дизайн биологически активных соединений

*(индекс, наименование дисциплины (модуля), в соответствии с учебным планом)*

Б1.О.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 - 2023

Пермь, 2022 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**

<b>Код компетенции</b>	<b>Наименование компетенции</b>	<b>Код индикатора достижения компетенции</b>	<b>Наименование индикатора достижения компетенции</b>	<b>Результаты обучения, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций</b>
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.	<b>На уровне умений:</b> - 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.	<b>На уровне знаний:</b> - 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.	<b>На уровне навыков:</b> - 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.	<b>На уровне умений:</b> - 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.	<b>На уровне знаний:</b> - 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.	<b>На уровне навыков:</b> - 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.О.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		
<b>Очная форма обучения</b>							
<b>Семестр № 5</b>							
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 АК_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга	8	–	–	4		О
Тема 1.10	Молекулярный докинг программой АК_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
<b>Всего:</b>		<b>108</b>	<b>20</b>	<b>–</b>	<b>52</b>	<b>36</b>	

*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 качественного 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 утверждённой программы дисциплины, даёт 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,

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

	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.	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		Допускает ошибки принципиального характера. Задания, на которые дан неправильный ответ, отражают как минимум один или более заявленных индикаторов компетенций	
	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.О.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. Хельтье Х.-Д., Зипль В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование: теория и практика / - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 318с.
5. Гаевый М.Д., Петров В.И., Гаевая 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.О.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 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. Тема 1.10. Молекулярный докинг программой АК\_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга. Рассматривает молекулярный докинг программой АК\_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.