

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич
Должность: исполняющий обязанности ректора
Дата подписания: 08.02.2022 13:54:39
Уникальный программный ключ:
4f6042f92f26818253a667205646475b93807ac6

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«Пермская государственная фармацевтическая академия»

Министерства здравоохранения Российской Федерации

Кафедра фармацевтической химии ФОО

(наименование кафедры)

УТВЕРЖДЕНА

решением кафедры

Протокол от « 30 » июня 2017 г.

№ 3

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.3.1. Молекулярный дизайн биологически активных веществ

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

Б1.В.ДВ.3.1. МДБАВ

(индекс, краткое наименование дисциплины)

19.03.01 Биотехнология

(код, наименование направления подготовки (специальности))

Фармацевтическая биотехнология

(направленность(и) (профиль (и)/специализация(и))

Бакалавр

(квалификация)

Очная

(форма(ы) обучения)

Год набора - 2018

Пермь, 2017 г.

Авторы–составители:

д-р. фармацевт. наук, профессор

зав. кафедрой фармацевтической химии ФОО

(ученая степень и(или) ученое звание, должность)

Коркодинова Л.М.

(Ф.И.О.)

канд. фармацевт. наук., доцент

кафедры фармацевтической химии ФОО

(ученая степень и(или) ученое звание, должность)

Андрюков К.В.

(Ф.И.О.)

Заведующий кафедрой

фармацевтической химии ФОО, д.ф.н., профессор, профессор

(наименование кафедры полностью)

(ученая степень и(или) ученое звание)

Коркодинова Л.М.

(Ф.И.О.)

СОДЕРЖАНИЕ

1.	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2.	Объем и место дисциплины в структуре ОПОП.....	4
3.	Содержание и структура дисциплины.....	5
4.	Фонд оценочных средств по дисциплине.....	9
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 освоения программы

1.1. Дисциплина по выбору Б1.В.ДВ.3.1. «Молекулярный дизайн биологически активных веществ» обеспечивает овладение следующими компетенциями: ОПК-3, ПК-1:

ОПК-3 – способность использовать знания о современной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества для понимания окружающего мира и явлений природы, формируется данной дисциплиной частично;

ПК-1 – способностью осуществлять технологический процесс в соответствии с регламентом и использовать технические средства для измерения основных параметров биотехнологических процессов, свойств сырья и продукции, формируется данной дисциплиной частично

1.2. В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть:

ОПК-3

– сформированы знания: о новых направлениях молекулярного дизайна БАВ, современных особенностях эффективного проведения научно-исследовательской работы, способы их применения с целью проведения молекулярного дизайна;

– сформированы умения: обосновывать актуальность и анализировать стратегические задачи в сфере молекулярного дизайна БАВ;

– сформированы навыки: определения практической значимости избранной темы научного исследования; навыками определения физических констант, использования спектроскопических и др. методов изучения свойств веществ.

ПК-1

– сформированы знания: об этапах проведения экспериментально-научных исследований, принципах планирования экспериментов и использования автоматизированных систем;

– сформированы умения: анализировать информацию об объектах и предметах исследования, определять научную новизну, планировать и моделировать эксперименты, осуществлять статистическое управление процессами, давать практическую оценку научно-технического уровня и эффективности научного исследования;

– сформированы навыки: владения научными подходами к выполнению исследовательской работы с учетом использования современных инновационных технологий в науке.

2. Объем и место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина по выбору Б1.В.ДВ.3.1. «Молекулярный дизайн биологически активных веществ» относится к вариативной части ОПОП, проводится в 5 семестре 3 курса, общая трудоемкость дисциплины – 144 часа / 4 зачётные единицы (з. е.).

Количество академических часов, выделенных на контактную работу с преподавателем – 76 часов по видам, из них лекции – 20 часов, практические занятия – 56 часов; на самостоятельную работу обучающихся – 68 часов.

Форма промежуточной аттестации в соответствии с учебным планом: зачёт.

Дисциплина реализуется после изучения дисциплин: Б1.Б.4 «Химия общая и неорганическая», Б1.Б.8 «Физика».

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 веществ (БАВ)	88	12		40	36	О
Тема 1.1	Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАВ. Подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры	8	2		4	2	О
Тема 1.2	Оценка биологической активности программой PASS online (виртуальный скрининг)	8	2		4	2	О
Тема 1.3	Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАВ	10	2		4	4	О
Тема 1.4	Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАВ	10	2		4	4	О
Тема 1.5	Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка	8			4	4	О
Тема 1.6	Теоретический расчёт констант	8			4	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		
	липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ						
Тема 1.7	Построение структур БАВ с заданными свойствами. Правило Липински	10	2		4	4	О
Тема 1.8	Молекулярный докинг. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus)	10	2		4	4	О
Тема 1.9	Молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга	8			4	4	О
Тема 1.10	Молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга	8			4	4	О
Раздел 2	Практические аспекты молекулярного дизайна БАВ	54	8		16	30	О
Тема 2.1	Модели качественного поиска БАВ. Способы создания, оценка и валидация	14	2		4	8	О

№ п/п	Наименование разделов, тем	Объем дисциплины, час.					Форма текущего контроля успеваемости и, промежуточной аттестации
		Всего часов	Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий			СР	
			Л	ЛЗ	ПЗ		
Тема 2.2	Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация	14	2		4	8	О
Тема 2.3	Способ поиска БАВ методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг)	14	2		4	8	О
Тема 2.4	Количественное прогнозирование биологической активности БАВ с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ	12	2		4	6	О
Промежуточная аттестация		2				2	Зачёт
Всего:		144	20		56	68	

Примечание:

**Формы текущего контроля успеваемости: опрос (О), тестирование (Т).*

3.2. 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. Понятия и цели молекулярного дизайна БАВ. 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 БАВ программой PASS online. Проведение виртуального скрининга программой PASS. Определение понятия «виртуальный скрининг». Терапевтическая мишень в онлайн сервисе PASS online. Прогноз спектра биологической активности БАВ. Основные положения: виртуальный скрининг; терапевтическая мишень; спектр биологической активности; профиль биологической активности.

Тема 1.3. Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАВ. Компьютерные программы для проведения квантово-химических расчётов. Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАВ. Методы квантово-химического расчёта структур. Квантово-химическое моделирование в анализе БАВ. Основные положения: геометрия молекулы; термодинамический дескриптор; частичный заряд атома; полуэмпирический метод PM3.

Тема 1.4. Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАВ. Компьютерные программы для проведения множественного регрессионного анализа. Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАВ. 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 БАВ. Основные положения: структурные дескрипторы; константа липофильности; константы ионизации.

Тема 1.7. Построение структур БАВ с заданными свойствами. Правило Липински. Построение структур БАВ с заданными свойствами. Основные положения: структурные дескрипторы; константа липофильности; молекулярная 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 БАВ.

Тема 2.1. Модели качественного поиска БАВ. Способы создания, оценка и валидация. Содержание темы: Модели качественного поиска БАВ. Способы создания. Оценка и валидация моделей качественного поиска БАВ. Качественный поиск БАВ. 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 БАВ. 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 БАВ методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг). Способ поиска БАВ 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 БАВ с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ. Методы количественного прогнозирования биологической активности БАВ. Прогнозирование биологической активности БАВ 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. Формы и материалы текущего контроля.

4.1.1. В ходе реализации дисциплины Б1.В.ДВ.3.1. «Молекулярный дизайн биологически активных веществ» используется следующая форма текущего контроля успеваемости обучающихся: опрос.

4.1.2. Материалы текущего контроля успеваемости.

Опрос на примере темы 1.1 «Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАВ»:

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 БАВ».
7. Опишите принцип отбора соединений в ряды.
8. Какие преимущества даёт дизайн БАВ 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 БАВ?

4.1.3. Шкала оценивания для текущего контроля.

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

В тестовых заданиях может быть один правильный ответ (1 балл)

1. Молекулярный дизайн БАВ это:

1. Молекулярный докинг веществ с ферментом
2. Рисование формул в химическом редакторе
3. Конструирование новых химических соединений с заданными свойствами
4. исследование биологической активности

2. Цель молекулярного дизайна БАВ:

1. Построение структуры с заданными свойствами
2. Поиск ингибиторов ДНК
3. Корреляционный анализ
4. Квантово-химические расчёты

3. Структурно-ориентированный дизайн заключается в:

1. Создании изомеров БАВ
2. Молекулярном докинге
3. Исследовании биологической активности

4. Создании множества разнообразных новых и экзотических молекулярных конструкций
 4. Стратегия молекулярного дизайна предполагает:
 1. Качественный поиск БАВ
 3. Глубокое понимание поставленной задачи, изучение молекулярных механизмов целевой функции вещества
 4. Функциональный дизайн
 5. Регрессионный анализ
 5. К терапевтическим мишеням при дизайне БАВ с противовоспалительной активностью относится
 1. Ферменты циклооксигеназа 1 и 2
 2. Анальгетическая активность
 3. Коагуляция молекулы белка
 4. Активный участок фермента фосфодиэстеразы
 6. Прогноз спектра биологической активности в онлайн сервисе PASS online используется для:
 1. Квантово- химических расчётов
 2. Биологических испытаний БАВ
 3. Построения структур соединений
 4. Поиска БАВ
 7. Виртуальный скрининг это:
 1. Испытание биологической активности
 2. Метод отбора перспективных БАВ с использованием компьютерных программ
 3. Построение гомологических рядов БАВ
 4. Способ построения структур БАВ
 8. Какой из приведенных методов квантово-химического расчёта структур относится к полуэмпирическим:
 1. Метод Хартри-Фока (HF)
 2. Метод функционала плотности (DFT)
 3. Метод Parametrison 3 (PM3)
 4. Метод молекулярной механики
 9. Квантово-химические расчёты проводят с использованием программы:
 1. Gaussian 03
 2. ACD Labs
 3. ChemDraw
 4. ChemSketch
 10. К методам проведения квантово-химических расчётов относится:
 1. Полуэмпирический метод
 2. Метод молекулярного докинга
 3. Структурный метод
 4. Фрагментарный метод
 11. Регрессионный анализ это:
 1. Способ оценки реакционной способности
 2. Моделирование БАВ
 3. Статистический метод исследования влияния одной или нескольких независимых переменных
 4. Исследование биологической активности
 12. Что такое множественный линейный регрессионный анализ:

1. Метод установления зависимости одной переменной от двух или более независимых переменных

2. Метод установления зависимости от одной переменной

3. Метод расчёта средней квадратичной ошибки

4. Способ оценки правильности построения структуры

13. Коэффициент корреляции (R) показывает:

1. Степень связи между двумя или несколькими независимыми переменными

2. Точность проведения квантово-химических расчётов

3. Независимость двух переменных друг от друга

4. Ошибку регрессионной модели

14. Какие дескрипторы можно использовать при описании структуры БАВ в качестве структурных:

1. Скрининговые

2. Функциональные

3. Коэффициенты уравнения множественной регрессии

4. Квантово-химические и физико-химические

15. Способ расчёта структурных дескрипторов БАВ:

1. Скрининговый

2. Квантово-химический

3. Экспоненциальный

4. физико-химический

16. Как проводят оценку моделей «структура-свойство» и «структура-активность» :

1. С использованием внешней выборки

2. С использованием теоретически рассчитанных свойств

3. По типу регрессионного уравнения

4. С использованием квантово-химических дескрипторов

17. В чём состоит цель использования синтеза в дизайне БАВ:

1. Исследование биологической активности

2. Расчёт физико-химических дескрипторов

3. Синтез соединений

4. Изучение свойств

18. С использованием каких компьютерных программ можно проводить расчёт констант липофильности ($\log P$) БАВ :

1. Gaussian 03

2. ChemDraw

3. ChemOffice и ACD ChemSketch

4. Microsoft Word

19. Что такое молекулярный докинг БАВ:

1. Способ проведения квантово-химических расчётов

2. Способ построения структуры БАВ

3. Это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой

4. Прогнозирование физико-химических свойств

20. Определение «активный центр» фермента:

1. Участок фермента обладающий гидрофобными свойствами

2. Область коферментная к лиганду
3. Это место на его поверхности, где происходит связывание и каталитическое превращение субстрата
4. Используется для расчёта физико-химических свойств фермента

4.2.3. Шкала оценивания.

Недифференцированная оценка

«зачтено» - правильных ответов 60% и более;

«не зачтено» - правильных ответов менее 60%.

5. Методические материалы по освоению дисциплины

Методические материалы для обучающихся на дисциплине Б1.В.ДВ.3.1 «Молекулярный дизайн биологически активных веществ». Полный комплект методических материалов находится на кафедре фармацевтической химии ФОО.

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. Лущекина С.В., Варфоломеев С.Д., Балабаев Н.К. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров. Издательство: ЛИБРОКОМ, 2009. – 581с.

4. Хельтье Х.-Д., Зиппль 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 укомплектованы 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 BuildModel, 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

Молекулярный дизайн биологически активных веществ

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

Квалификация (степень) выпускника: бакалавр.

Форма обучения: очная.

Формируемые компетенции:

Дисциплина по выбору Б1.В.ДВ.3.1. «Молекулярный дизайн биологически активных веществ» обеспечивает овладение следующими компетенциями: ОПК-3, ПК-10:

ОПК-3 – способность использовать знания о современной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества для понимания окружающего мира и явлений природы, формируется данной дисциплиной частично;

ПК-10 – владение планированием эксперимента, обработки и представления полученных результатов, формируются данной дисциплиной частично.

В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть:

ОПК-3

– сформированы знания: о новых направлениях молекулярного дизайна БАВ, современных особенностях эффективного проведения научно-исследовательской работы, способы их применения с целью проведения молекулярного дизайна;

– сформированы умения: обосновывать актуальность и анализировать стратегические задачи в сфере молекулярного дизайна БАВ;

– сформированы навыки: определения практической значимости избранной темы научного исследования; навыками определения физических констант, использования спектроскопических и др. методов изучения свойств веществ.

ПК-10

– сформированы знания: об этапах проведения экспериментально-научных исследований, принципах планирования экспериментов и использования автоматизированных систем;

– сформированы умения: анализировать информацию об объектах и предметах исследования, определять научную новизну, планировать и моделировать эксперименты, осуществлять статистическое управление процессами, давать практическую оценку научно-технического уровня и эффективности научного исследования;

– сформированы навыки: владения научными подходами к выполнению исследовательской работы с учетом использования современных инновационных технологий в науке.

Объем и место дисциплины в структуре ОПОП:

Дисциплина по выбору Б1.В.ДВ.3.1. «Молекулярный дизайн биологически активных веществ» относится к вариативной части ОПОП, проводится в 5 семестре 3 курса, общая трудоемкость дисциплины – 144 часа / 4 зачётные единицы (з. е.).

Количество академических часов, выделенных на контактную работу с преподавателем – 76 часов по видам, из них лекции – 20 часов, практические занятия – 56 часов; на самостоятельную работу обучающихся – 68 часов.

Форма промежуточной аттестации в соответствии с учебным планом: зачёт.

Дисциплина реализуется после изучения дисциплин: химия общая и неорганическая, физика.

План 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. 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 БАВ с заданными свойствами. Правило Липински. В теме рассматривается построение структур БАВ 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 БАВ.

Тема 2.1. Модели качественного поиска БАВ. Способы создания, оценка и валидация. В теме изучаются модели качественного поиска БАВ, 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 БАВ, способы их создания, оценка и валидация.

Тема 2.3. Способ поиска БАВ методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг). Рассматривается способ поиска БАВ методом молекулярного докинга.

Тема 2.4. Количественное прогнозирование биологической активности БАВ с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ. Изучаются методы количественного прогнозирования биологической активности БАВ.

Формы текущего контроля и промежуточной аттестации:

Форма текущего контроля: опрос.

Форма промежуточной аттестации : зачёт.