

Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: Лужанин Владимир Григорьевич
 Должность: Ректор
 Дата подписания: 29.08.2023 13:49:34
 Уникальный программный ключ:
 d56ba45a9b6e5c64a319e2c5ae3bb2cddb840af0

ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ДИАГНОСТИЧЕСКОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Б1.О.29 МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Номер задания		Содержание вопроса		Правильный ответ		Компетенции																					
1. Задание закрытого типа на установление соответствия																											
1		Установите соответствие между дескриптором и способом его моделирования <table><tr><td>Дескриптор</td><td>Способ моделирования</td></tr><tr><td>1) биологическая активность 2) свойство 3) заряд 4) скоринговая функция</td><td>а) квантово-химические расчёты б) структура- активность в) молекулярный докинг г) структура- свойства</td></tr></table> Запишите выбранные буквы под соответствующими цифрами: <table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></table>		Дескриптор	Способ моделирования	1) биологическая активность 2) свойство 3) заряд 4) скоринговая функция	а) квантово-химические расчёты б) структура- активность в) молекулярный докинг г) структура- свойства	1	2	3	4					<table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td>б</td><td>г</td><td>а</td><td>в</td></tr></table>		1	2	3	4	б	г	а	в	ПК-4	
Дескриптор	Способ моделирования																										
1) биологическая активность 2) свойство 3) заряд 4) скоринговая функция	а) квантово-химические расчёты б) структура- активность в) молекулярный докинг г) структура- свойства																										
1	2	3	4																								
1	2	3	4																								
б	г	а	в																								
2		Установите соответствие между направлением молекулярного дизайна и его объектом. НАПРАВЛЕНИЕ: 1. Структурно-ориентированный 2. Функционально-ориентированный ЦЕЛЬ: А) Функция Б) Структура Запишите выбранные буквы под соответствующими цифрами: <table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td></td><td></td></tr></table>		1	2			<table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td>Б</td><td>А</td></tr></table>		1	2	Б	А	ПК-4													
1	2																										
1	2																										
Б	А																										
3		Установите соответствие между термином молекулярного дизайна и его определением. ТЕРМИН: 1. виртуальный скрининг 2. терапевтическая мишень ОПРЕДЕЛЕНИЕ: А) это вычислительная процедура, которая включает автоматизированный просмотр базы данных химических соединений. Б) ферменты, которые лежат в основе изучаемой биологической активности: <table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td></td><td></td></tr></table>		1	2			<table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td>А</td><td>Б</td></tr></table>		1	2	А	Б	ПК-4													
1	2																										
1	2																										
А	Б																										

4	Установите соответствие между методом квантово-химических расчётов, и к какой группе по классификации он относится <table><tr><th>Метод</th><th>Группа по классификации</th></tr><tr><td>1) MM 2) PM3 3) AM1 4) HF</td><td>а) полуэмпирический б) молекулярной механики в) неэмпирический г) функционально-плоскостной</td></tr></table> Запишите выбранные буквы под соответствующими цифрами: <table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></table>	Метод	Группа по классификации	1) MM 2) PM3 3) AM1 4) HF	а) полуэмпирический б) молекулярной механики в) неэмпирический г) функционально-плоскостной	1	2	3	4					<table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td>б</td><td>а</td><td>а</td><td>в</td></tr></table>	1	2	3	4	б	а	а	в	ПК-4
Метод	Группа по классификации																						
1) MM 2) PM3 3) AM1 4) HF	а) полуэмпирический б) молекулярной механики в) неэмпирический г) функционально-плоскостной																						
1	2	3	4																				
1	2	3	4																				
б	а	а	в																				
5	Установите соответствие между видом исследований структура-активность и результатом прогнозирования биологической активности. ВИД: 1. качественное 2. количественное РЕЗУЛЬТАТ: А) величина биологической активности. Б) соединение «активно» или «неактивно»: <table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td></td><td></td></tr></table>	1	2			<table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td>Б</td><td>А</td></tr></table>	1	2	Б	А	ПК-4												
1	2																						
1	2																						
Б	А																						
6	Установите соответствие между видом молекулярного дизайна БАС и направлением использования <table><tr><th>Молекулярный дизайн БАС</th><th>Результат</th></tr><tr><td>1) фармакофорный 2) квантово-химический 3) регрессионный 4) корреляционный</td><td>а) моделирование б) анализ корреляций в) квантовая химия г) молекулярный докинг</td></tr></table> Запишите выбранные буквы под соответствующими цифрами: <table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td></td><td></td><td></td><td></td></tr></table>	Молекулярный дизайн БАС	Результат	1) фармакофорный 2) квантово-химический 3) регрессионный 4) корреляционный	а) моделирование б) анализ корреляций в) квантовая химия г) молекулярный докинг	1	2	3	4					<table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td>г</td><td>в</td><td>а</td><td>б</td></tr></table>	1	2	3	4	г	в	а	б	ПК-4
Молекулярный дизайн БАС	Результат																						
1) фармакофорный 2) квантово-химический 3) регрессионный 4) корреляционный	а) моделирование б) анализ корреляций в) квантовая химия г) молекулярный докинг																						
1	2	3	4																				
1	2	3	4																				
г	в	а	б																				
2. Задание закрытого типа на установление последовательности																							
7	Установите правильную последовательность молекулярного докинга 1) выбор мишени биологической активности 2) оптимизация структуры БАС	21534	ПК-4																				

	3) Молекулярный докинг 4) Фармакофорный анализ 5) Изучение механизма взаимодействия с мишенью Ответ запишите в виде последовательности цифр.		
8	Установите правильную последовательность проведения регрессионного моделирования 1) выбор структурных дескрипторов 2) корреляционный анализ 3) выбор биологической активности 4) дизайн БАС 5) регрессионное моделирование Ответ запишите в виде последовательности цифр.	34125	ПК-4
9	Установите правильную последовательность проведения виртуального скрининга сервисом PASS Online 1) отбор результатов с P_a 0,7 и более 2) сортировка полученных результатов 3) анализ результатов по прогнозу активности 4) построение структуры БАС 5) прогноз спектра биологической активности Ответ запишите в виде последовательности цифр.	45123	ПК-4
10	Установите правильную последовательность поиска мишени биологической активности 1) прогнозирование сервисом PASS 2) анализ результатов по прогнозу ингибирования мишеней 3) построение структуры БАС 4) отбор значимых результатов с P_a 0,7 и более Ответ запишите в виде последовательности цифр.	3124	ПК-4
11	Установите правильную последовательность корреляционного анализа 1) построение структуры в химическом редакторе 2) построение таблиц 3) корреляционный анализ MS Excel 4) построение брутто-формулы 5) расчёт дескрипторов атомной массы Ответ запишите в виде последовательности цифр	14523	ПК-4
12	Установите правильную последовательность молекулярного дизайна БАС 1) построение структур БАС 2) оценка полученных результатов 3) построение модели конструирования 4) выбор активности 5) прогноз активности структур БАС Ответ запишите в виде последовательности цифр	41523	ПК-4
3. Задание открытого типа с развернутым ответом/задача			
13	Что такое фармакофорные центры и их взаимное расположение в пространстве, необходимые для проявления данного типа биологической активности?	Фармакофорные признаки участка связывания	ПК-4
14	Какая модель позволяет объяснить, за счёт чего структурно разнородные лиганды взаимодействуют с одними и теми же сайтами рецепторов?	Модель фармакофора	ПК-4
15	Какой тип корреляции, когда две переменные движутся в разных направлениях таким образом,	Отрицательная	ПК-4

	что увеличение одной переменной приведет к уменьшению другой переменной, и наоборот?		
16	В качестве какого компонента лиганд-белкового комплекса используют фермент в методе молекулярного докинга лиганда?	Биологическая мишень	ПК-4
17	Какой метод структурного моделирования целевого соединения применяется, чтобы добиться максимальной эффективности в выполнении им требуемой функции?	Оптимизация структуры БАС	ПК-4
18	Как называется метод анализа, который заключается в отборе значимых дескрипторов?	Корреляционный метод	ПК-4
4. Задания открытого типа с кратким ответом / вставить термин, словосочетание....., дополнить предложенное			
19	Метод расчёта структурных дескрипторов БАВ с использованием квантово-химических программ с использованием метода РМЗ относится к _____.	Полуэмпирическим	ПК-4
20	Метод молекулярного моделирования БАВ, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой – это молекулярный _____.	Докинг	ПК-4
21	Зависимость (корреляция) двух переменных друг от друга показывает коэффициент _____.	Корреляции	ПК-4
22	Онлайн сервис с помощью которого можно оценить вероятность проявления биологической активности БАВ – _____.	PASS online	ПК-4
23	Требование к молекуле БАВ проявляющей биологическую активность по правилу «пяти Липински» по молекулярной массе, должно быть не более (напишите число словом) – _____.	Пятьсот	ПК-4
24	Какое свойство химическое характеризуют константы ионизации (кислотности (pKa) и основности (pKв)) БАВ характеризуют – _____.	Ионизация	ПК-4
5. Задания комбинированного типа с выбором одного/нескольких правильного ответа из предложенных с последующим объяснением своего выбора			
25	Прочитайте вопрос, выберите правильный ответ и дайте обоснование. Виртуальный скрининг это: А) Испытание биологической активности В) Теоретический метод отбора перспективных БАВ с использованием компьютерных программ С) Построение гомологических рядов БАВ D) Способ построения структур БАВ	В Отбор проводят с использованием компьютерных сервисов и программ	ПК-4
26	Прочитайте вопрос, выберите правильный ответ и дайте обоснование. К фармакофорному моделированию БАВ относится А) Использование молекулярной массы	С Заключается в использовании молекулярного докинга	ПК-4

	В) Проведение квантово-химические расчёты С) Использование общей структуры фармакофора БАВ Д) прогнозирование онлайн сервисом PASS		
27	Прочитайте вопрос, выберите правильный ответ и дайте обоснование. С какой целью проводят синтез в молекулярном дизайне БАС: А) Исследование биологической активности В) Расчёт физико-химических дескрипторов С) Синтез и исследование биологической активности БАВ Д) Изучение поляризуемости	С Доказательство и проверка модели	ПК-4
28	Прочитайте вопрос, выберите правильный ответ и дайте обоснование. Какой дескриптор относится к скоринговым функциям в молекулярном докинге: А) Константы ионизации (pKa и pKb) В) Константа липофильности (logP) С) Скоринговая функция характеризующая энергию связывания с ферментом (Be) Д) Суммарный заряд молекулы	С Получают в результате молекулярного докинга	ПК-4
29	Прочитайте вопрос, выберите правильный ответ и дайте обоснование. Комбинаторный анализ методом перебора заключается в: А) Исследовании биологической активности БАС В) Поиске БАС путём перебора серий аналогичных соединений с различными заместителями С) Квантово- химических расчётах БАС Д) Конформационном поиске БАС	В Заключатся в разбиении молекул БАС на отдельные фрагменты и конструировании	ПК-4
30	Прочитайте вопрос, выберите правильный ответ и дайте обоснование. Какой из приведенных методов квантово-химического расчёта структур БАВ относится к полуэмпирическим: А) Метод Хартри-Фока (HF) В) Метод функционала плотности (DFT) С) Метод Parametrison 3 (PM3) Д) Метод молекулярной механики	С Относится к упрощенным методам расчёта и быстрым	ПК-4