

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»  
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

СОГЛАСОВАНО

Руководитель ОПОП

\_\_\_\_\_ А.В. Великородов

05 июня 2022 г.

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_ А.В. Великородов

06 июня 2022 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ  
АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ**

Составитель	Щепетова Е.В., доцент, к.б.н., доцент
Направление подготовки	04.03.01 Химия
Направленность (профиль ОПОП)	Медицинская и фармацевтическая химия
Квалификация (степень)	бакалавр
Форма обучения	очно-заочная
Год приёма	2020
Курс	3
Семестр	5

Астрахань, 2022 г.

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целью освоения дисциплины является формирование у студентов знаний и умений, позволяющих проводить целенаправленный поиск молекулярных структур новых физиологически активных соединений с прогнозируемыми видами биологической активности

1.2. Задачи освоения дисциплины:

ознакомление с программными средствами компьютерного молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов; раскрытие роли компьютерного молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов для поиска новых биологически активных веществ, его значимость для современной медицинской химии и фармакологии; изучение основ компьютерного молекулярного моделирования и конструирования лекарственных препаратов, его классификаций, сфер применения; освоение основных приемов и методов компьютерного молекулярного моделирования и конструирования с целью поиска новых лекарственных препаратов. □

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина относится к факультативной дисциплине учебного плана подготовки бакалавров.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения, навыки, формируемые предшествующими дисциплинами: учебный курс логически связан с теоретическими основами и практическими навыками, полученными при изучении бакалаврами курсов дисциплин: «Химические основы биологических процессов» «Информатика», «Численные методы в химии», «Компьютерная химия», «Квантовая механика и квантовая химия». Следовательно, «входные» знания и умения обучающегося связаны со знанием теоретических основ вышеперечисленных дисциплин.

Знания: место квантовой химии в ряду других естественных дисциплин, ее значение для современного научного сообщества и жизнедеятельности людей. Основные модели и методы описания органических, металлоорганических, неорганических и биохимических соединений, изучение электронного строения, физических и химических свойств. Данная область исследования тесно связана с моделированием лекарственных препаратов и других физиологически активных веществ, поэтому результаты полученных знаний могут быть применимы в медицине и пищевой промышленности (получение красителей).

Умения: осуществлять постановку вычислительного эксперимента, анализировать современные модели, методы и теории квантовой механики, проводить расчет электронного строения молекул, вычислять термодинамические и кинетические параметры на примере простейших химических реакций, осуществлять интерпретацию полученных результатов и составлять различные модели описания химических процессов. Данная компетенция находит практическое применение в медицине и научно-исследовательских институтах при моделировании статичности и динамики биохимических процессов, исследовании электронных переходов в сложных биосистемах.

Навыки: должен владеть основами работы на компьютере в операционных системах семейства Windows, в программах Microsoft Word, Microsoft Excel (для составления графиков и диаграмм), Adobe Photoshop (для создания рисунков), HyperChem, ISIS/Draw, ChemOffice, Discovery Studio ViewerPro, PASS (для создания молекулярных структур и расчетов их свойств, структурных химических формул). Построение 3D-моделей молекул, постановка задачи исследования на основе сведений (предварительного) эксперимента, молекулярное моделирование с применением вычислительных программ – составление молекулярных диаграмм, расчет индексов реакционной способности молекулы, вычисление энергии молекулярных орбиталей молекулы, катиона, аниона, построение энергетического профиля реакции, вычисление барьеров внутреннего вращения, расчет термодинамических параметров системы (изменение энтальпии, изменение энтропии, изменение

изобарно-изотермического потенциала), расчет кинетических параметров (константы реакции, скорости реакции, изменение энтальпии, изменение энтропии, изменение изобарно-изотермического потенциала), регистрация, обработка и интерпретация результатов вычислительного эксперимента. Практическая реализация – дескрипторный анализ лекарственных препаратов, биологических компонентов, ферментов и/или новых синтезированных органических соединений.

Дисциплина встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

### 3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

**б) общепрофессиональных (ОПК):**

ОПК-3 «Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники»

**Таблица 1 - Декомпозиция результатов обучения**

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
	Знать	Уметь	Владеть
ОПК-3 «Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники»	место квантовой химии в ряду других естественных дисциплин, ее значение для современного научного сообщества и жизнедеятельности людей	осуществлять постановку вычислительного эксперимента, анализировать современные модели, методы и теории квантовой механики	основами работы на компьютере в операционных системах семейства Windows, в программах Microsoft Word, Microsoft Excel и другими

Код компетенции	Результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ОПК-3	ИОПК 3.1.1 теоретические и полужемпирические модели при решении задач химической направленности	ИОПК 3.1.2 использовать стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	ИОПК 3.1.3 теоретическими и полужемпирическими моделями при решении задач химической направленности

### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объём дисциплины (модуля) составляет 2 зачётные единицы, в том числе 36 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них 18 часов – лекции, 18 часов – практических занятий) и 36 часов – на самостоятельную работу обучающихся.

**Таблица 2- Структура и содержание дисциплины (модуля)**

№ п/п	Наименование раздела (темы)	Се- ме- стр	Неде- ля се- мест- ра	Контактная работа (в часах)			Самостоят. работа		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семест- рам)
				Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
1	Введение. Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов	5	1,2,3	3	3			6	Собеседование
2	Компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск	5	4,5,6	3	3			6	Собеседование
3	Получение и использование трехмерных фармакофоров	5	7,8,9	3	3			6	Собеседование
4	Молекулярный докинг. Молекулярные дескрипторы	5	10,11, 12	3	3			6	Собеседование
5	Структурно-основанное проектирование лигандов <i>de novo</i>	5	13,14, 15	3	3			6	Собеседование
6	Количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR)	5	16,17, 18	3	3			6	Собеседование
Итого				18	18			36	Зачет

Условные обозначения:

Л – занятия лекционного типа; ПЗ – практические занятия, семинары, ЛР – лабораторные работы; КР – курсовая работа; СР – самостоятельная работа по отдельным темам

**Таблица 3- Матрица соотношения разделов, тем учебной дисциплины (модуля) и формируемых компетенций**

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции	Σ общее количество компетенций
		ОПК-3	
Введение. Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов	12	+	1
Компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск	12	+	
Получение и использование трехмерных фармакофоров	12	+	1
Молекулярный докинг. Молекулярные дескрипторы	12	+	1
Структурно-основанное проектирование лигандов <i>de novo</i>	12	+	1

Количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR)	12	+	1
	72		

### Содержание каждой темы дисциплины (модуля)

**Тема 1. Введение. Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов.** Определение макромолекулы и лиганда. Типы лекарственных препаратов: агонисты, антагонисты, обратные агонисты. Основные требования к лекарственному препарату. «Хитовые» молекулы и «лидерные» серии. Высокопроизводительный скрининг. Основные проблемы поиска новых лекарственных средств и необходимость использования вычислительных методов.

**Тема 2. Компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск.** Базы данных химических соединений. Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций). Основы двумерного субструктурного поиска.

**Тема 3. Получение и использование трехмерных фармакофоров.** Преимущества трехмерных баз данных перед двухмерными. Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомолекул. Определение трехмерного фармакофора и биоизостерных групп. Картография фармакофора. Проблемы расчета трехмерных фармакофоров. Включение дополнительных геометрических особенностей в трехмерный фармакофор. Источники данных для трехмерных баз данных. Фармакофорные ключи.

**Тема 4. Молекулярный докинг. Молекулярные дескрипторы.** Сущность молекулярного докинга. Основные проблемы в молекулярном докинге. Функции выигрыша в молекулярном докинге, используемые алгоритмы оптимизации. Программы для поиска в трехмерных базах данных и докинга. Молекулярное подобие и поиск подобия. Типы молекулярных дескрипторов. Коэффициенты распределения: физический смысл и методы расчета, используемые программы. Молярная рефракция: формулы для расчета и используемые программы. Топологические индексы и их разновидности. Фармакофорные ключи как молекулярные дескрипторы.

**Тема 5. Структурно-основанное проектирование лигандов *de novo*.** Расположение благоприятных позиций молекулярных фрагментов в пределах участка связывания. Соединение молекулярных фрагментов в участке связывания. Методы структурно-основанного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы ВИЧ-1.

### **Тема 6. Количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR).**

Отбор соединений для QSAR-анализа. Получение QSAR-уравнений. Перекрестная проверка правильности. Интерпретация QSAR-уравнений.

## 5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

5.1. Указания для преподавателей по организации и проведению учебных занятий по дисциплине (модулю).

Лекции и практические занятия проводятся через неделю в объеме 2 часа. По окончании 5 семестра студенты сдают зачет.

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля).

Перечень учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] / И.Г. Каплан. - М. : БИНОМ, 2014. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556.html> (ЭБС «Консультант студента»)

**Таблица 4- Содержание самостоятельной работы обучающихся**

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов Основные требования к лекарственному препарату. «Хитовые» молекулы и «лидерные» серии. Высокопроизводительный скрининг. Основные проблемы поиска новых лекарственных средств и необходимость использования вычислительных методов.	6	Собеседование
Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций). Основы двумерного субструктурного поиска	6	Собеседование
Определение трехмерного фармакофора и биоизостерных групп. Картография фармакофора.	6	Собеседование
Программы для поиска в трехмерных базах данных и докинга. Молекулярное подобие и поиск подобия.	6	Собеседование
Методы структурно-основанного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы ВИЧ-1	6	Собеседование
Перекрестная проверка правильности. Интерпретация QSAR-уравнений.	6	Собеседование

5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины, выполняемые обучающимися самостоятельно: итоговое тестирование.

#### **Вопросы для самоподготовки**

1. Высокопроизводительный скрининг. Основные проблемы поиска новых лекарственных средств и необходимость использования вычислительных методов.
2. Основы двумерного субструктурного поиска.
3. Источники данных для трехмерных баз данных. Фармакофорные ключи.
4. Молярная рефракция: формулы для расчета и используемые программы. Топологические индексы и их разновидности. Фармакофорные ключи как молекулярные дескрипторы.
6. Методы структурно-основанного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы ВИЧ-1.
7. Интерпретация QSAR-уравнений.
8. Программа PASS и ее возможности.

## **6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

### **6.1. Образовательные технологии**

**Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий**

Раздел, тема дисциплины	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Введение. Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов	Обзорная лекция	Практическое занятие	Лабораторная работа не предусмотрена
Компьютерное представле-	Обзорная	Практическое занятие	Лабораторная работа не

ние молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск	лекция		предусмотрена
Получение и использование трехмерных фармакофоров	Обзорная лекция	Практическое занятие	Лабораторная работа не предусмотрена
Молекулярный докинг. Молекулярные дескрипторы	Обзорная лекция	Практическое занятие	Лабораторная работа не предусмотрена
Структурно-основанное проектирование лигандов <i>de novo</i>	Обзорная лекция	Практическое занятие	Лабораторная работа не предусмотрена
Количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR)	Обзорная лекция	Практическое занятие	Лабораторная работа не предусмотрена

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и off-line (формах: лекций-презентаций, собеседования в режиме чат, форума, чата, выполнения виртуальных лабораторных работ.

## 6.2. Информационные технологии

Интернет-ресурсы [www.asu.edu.ru](http://www.asu.edu.ru) (представлены учебно-методические материалы для усвоения студентами курса;

Электронный образовательный ресурс по курсу «Компьютерное моделирование ФАВ», представленный на платформе moodle по адресу <http://moodle.asu.edu.ru>

Для оперативной связи со студентами предполагается возможность использования электронной почты преподавателя.

## 6.3. Программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

### 6.3.1. Программное обеспечение

Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Наименование программного обеспечения	Назначение
Adobe Reader	Программа для просмотра электронных документов
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle «Электронное образование» или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров	Виртуальная обучающая среда
Mozilla FireFox	Браузер
Microsoft Office 2013, Microsoft Office Project 2013, Microsoft Office Visio 2013	Пакет офисных программ
7-zip	Архиватор
Microsoft Windows 7 Professional	Операционная система
Kaspersky Endpoint Security	Средство антивирусной защиты
Google Chrome	Браузер
Notepad++	Текстовый редактор
OpenOffice	Пакет офисных программ
Opera	Браузер
Paint .NET	Растровый графический редактор

Microsoft Security Assessment Tool. Режим доступа: <a href="http://www.microsoft.com/ru-ru/download/details.aspx?id=12273">http://www.microsoft.com/ru-ru/download/details.aspx?id=12273</a> (Free) Windows Security Risk Management Guide Tools and Templates. Режим доступа: <a href="http://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=6232">http://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=6232</a> (Free)	Программы для информационной безопасности
WinDjView	Программа для просмотра файлов в формате DJV и DjVu
IBM SPSS Statistics 21	Программа для статистической обработки данных

### 6.3.2. Современные информационные базы данных и информационных справочных систем

[Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС»](http://dlib.eastview.com)

<http://dlib.eastview.com>

Имя пользователя: AstrGU

Пароль: AstrGU

Электронные версии периодических изданий, размещённые на сайте информационных ресурсов

[www.polpred.com](http://www.polpred.com)

Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARKSQL НПО «Информ-систем»

<https://library.asu.edu.ru/catalog/>

Электронный каталог «Научные журналы АГУ»

<https://journal.asu.edu.ru/>

Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИ-КОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек.

<http://mars.arbicon.ru>

Справочная правовая система КонсультантПлюс.

Содержится огромный массив справочной правовой информации, российское и региональное законодательство, судебную практику, финансовые и кадровые консультации, консультации для бюджетных организаций, комментарии законодательства, формы документов, проекты нормативных правовых актов, международные правовые акты, правовые акты, технические нормы и правила.

<http://www.consultant.ru>

## 7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 7.1. Паспорт фонда оценочных средств.

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Компьютерное моделирование физиологически активных веществ» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой разделов, тем.

**Таблица 6. - Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств**

№ п/п	Контролируемый раздел, тема дисциплины	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
1	Введение. Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов	ОПК-3	Собеседование
1	Компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск	ОПК-3	Собеседование
1	Получение и использование трехмерных фармакофоров	ОПК-3	Собеседование
1	Молекулярный докинг. Молекулярные дескрипторы	ОПК-3	Собеседование
1	Структурно-основанное проектирование лигандов <i>de novo</i>	ОПК-3	Собеседование
1	Количественные соотношения структура-активность (КССА, QSAR)	ОПК-3	Собеседование

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания.

Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания приведены в таблице 7 и 8.

**Таблица 7. Показатели оценивания результатов и обучения в виде знаний**

5 «отлично»	- демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы, приводить примеры;
4 «хорошо»	- демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя;
3 «удовлетворительно»	- демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов;
2 «неудовлетворительно»	- демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры.

**Таблица 8 - Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений**

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы

	ды, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует отдельные, несистематизированные навыки, не способен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание при подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задание

7.3. Контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

### **Вопросы для собеседования**

по дисциплине «Компьютерное моделирование физиологически активных веществ»

#### **Тема «Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов»**

1. Определение макромолекулы и лиганда.
2. Типы лекарственных препаратов: агонисты, антагонисты, обратные агонисты.
3. Основные требования к лекарственному препарату.
4. «Хитовые» молекулы и «лидерные» серии.
5. Высокопроизводительный скрининг.

#### **Тема «Компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск»**

1. Базы данных химических соединений.
2. Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы,
3. MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций).
4. Основы двумерного субструктурного поиска.

#### **Тема «Получение и использование трехмерных фармакофоров»**

1. Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомолекул.
2. Определение трехмерного фармакофора и биоизостерных групп.
3. Картография фармакофора. Проблемы расчета трехмерных фармакофоров.
4. Включение дополнительных геометрических особенностей в трехмерный фармакофор.
5. Источники данных для трехмерных баз данных.

#### **Тема «Молекулярный докинг. Молекулярные дескрипторы»**

1. Основные проблемы в молекулярном докинге.
2. Функции выигрыша в молекулярном докинге, используемые алгоритмы оптимизации. Программы для поиска в трехмерных базах данных и докинга.
3. Молекулярное подобие и поиск подобия. Типы молекулярных дескрипторов.
4. Коэффициенты распределения: физический смысл и методы расчета, используемые программы.
5. Молярная рефракция: формулы для расчета и используемые программы.

#### **Тема «Структурно-основанное проектирование лигандов *de novo*»**

1. Расположение благоприятных позиций молекулярных фрагментов в пределах участка связывания.
2. Соединение молекулярных фрагментов в участке связывания.

3. Методы структурно-основанного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы ВИЧ-1.

### Тема «Количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR)»

1. Отбор соединений для QSAR-анализа.
2. Получение QSAR-уравнений. Перекрестная проверка правильности.
3. Интерпретация QSAR-уравнений.

### Перечень вопросов и заданий, выносимых на зачет

1. Типы лекарственных препаратов: агонисты, антагонисты, обратные агонисты. Основные требования к лекарственному препарату.
2. «Хитовые» молекулы и «лидерные» серии. Высокопроизводительный скрининг. Основные проблемы поиска новых лекарственных средств и необходимость использования вычислительных методов.
3. Базы данных химических соединений. Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций).
4. Преимущества трехмерных баз данных перед двухмерными. Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомакромолекул. Определение трехмерного фармакофора и биоизостерных групп. Картография фармакофора.
5. Источники данных для трехмерных баз данных. Фармакофорные ключи.
6. Сущность молекулярного докинга. Основные проблемы в молекулярном докинге. Функции выигрыша в молекулярном докинге, используемые алгоритмы оптимизации.
- 7 Программы для поиска в трехмерных базах данных и докинга. Молекулярное подобие и поиск подобия.
8. Типы молекулярных дескрипторов. Коэффициенты распределения: физический смысл и методы расчета, используемые программы.
9. Молярная рефракция: формулы для расчета и используемые программы. Топологические индексы и их разновидности. Фармакофорные ключи как молекулярные дескрипторы.
10. Методы структурно-основанного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы ВИЧ-1.
11. Отбор соединений для QSAR-анализа. Получение QSAR-уравнений. Перекрестная проверка правильности. Интерпретация QSAR-уравнений.

**Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов**

№	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ОПК-3 «Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники»				
1.	Задание закрытого типа	Какие задачи позволяет решать система PASS А) моделировать структуру химического соединения Б) исследовать острую суточную токсичность В) прогнозировать потенциальную биологическую активность	В	3
2.		Какие задачи позволяет решать	А	3

		<p>QSAR-анализ</p> <p>А) построение моделей, позволяющих по структурам химических соединений предсказывать их разнообразные свойства</p> <p>Б) изучать минимальную ингибирующую концентрацию веществ</p> <p>В) изучать минимальную бактерицидную концентрацию</p>		
3.		<p>Какие возможности предоставляет молекулярный докинг</p> <p>А) позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и конформацию одной молекулы (лиганда) в сайте связывания другой</p> <p>Б) построение моделей, позволяющих по структурам химических соединений предсказывать их разнообразные свойства</p> <p>В) изучать минимальную бактерицидную концентрацию</p>	А	3
4.		<p>Минимальная ингибирующая концентрация это</p> <p>А) наименьшая дозировка антибиотика, останавливающая рост бактерии</p> <p>Б) наименьшая дозировка антибиотика, убивающая бактерии</p>	А	2
5.		<p>Минимальная бактерицидная концентрация это</p> <p>А) наименьшая дозировка антибиотика, останавливающая рост бактерии</p> <p>Б) минимальная концентрация антибиотика в питательной среде, при которой проявляется его бактерицидное действие по отношению к возбудителю</p>	Б	3
1.	Задание открытого типа	Дайте определение агонистам	Агонист — химическое соединение, которое при взаимодействии с рецептором изменяет его состояние, приводя к биологическому отклику. Обычные агонисты увеличивают отклик рецептора, обратные агонисты уменьшают его, а антагонисты блокиру-	5

			ют действие рецептора	
2.		Дайте определение антагонистам	Антагонист — вещество, которое ослабляет действие другого вещества или проявляет противоположные эффекты	5
3.			Обратный агонист - это химическое соединение, которое связывается с тем же самым клеточным рецептором, что и агонист, однако производит физиологические эффекты, в целом противоположные физиологическим эффектам агониста	5
4.		Охарактеризуйте основные требования к лекарственному препарату.	Гарантия их соответствия своему назначению, соответствие требованиям регистрационного досье и (или) протоколу клинического исследования и минимум риска для пациентов, безопасность, качество и эффективность лекарственных средств	5
5.		Перечислите основные классы антибиотиков	пенициллины, цефалоспорины и родственные антибиотики; циклосерины; тетрациклины; стрептомицин и другие аминогликозидные антибиотики; пурамицин; хлорамфениколы; эритромицин и другие макролиды;	10

			ансамacroлиды; актиномицины; антрациклины; оливомицины; блеомицины; стрептонигрин; митомицины; полиеновые анти- биотики; гризеофульвин; фитонциды.	
--	--	--	--	--

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

### ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА

Дисциплина «Компьютерное моделирование ФАВ»

Курс 3, семестр 5

Кафедра органической, неорганической и фармацевтической химии

Преподаватель – Щепетова Е.В., к.б.н., доцент кафедры органической, неорганической и фармацевтической химии

Трудоемкость дисциплины 72 часа

Число дидактических единиц 6

Максимальное количество баллов за работу в течение семестра 100 баллов

**Таблица 10 - Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине (модулю)**

№ п/п	Контролируемые мероприятия	Максимальное количество баллов	Срок предоставления
<b>Основной блок</b>			
1.	Собеседование по теме «Молекулярное моделирование в поиске лекарственных препаратов»	<b>10</b>	по расписанию
2.	Собеседование по теме «Компьютерное представление молекул, химические базы данных и двумерный субструктурный поиск»	<b>10</b>	по расписанию
3.	Собеседование по теме «Получение и использование трехмерных фармакофоров»	<b>10</b>	по расписанию
4.	Собеседование по теме «Молекулярный докинг. Молекулярные дескрипторы»	<b>10</b>	по расписанию
5.	Собеседование по теме «Структурно-основанное проектирование лигандов <i>de novo</i> »	<b>10</b>	по расписанию
6.	Собеседование по теме «Количественные соотношения структура–активность (КССА, QSAR)»	<b>10</b>	по расписанию
	Зачет	<b>40</b>	по расписанию
<b>Всего</b>		<b>100</b>	

**Таблица 11 – Система бонусов и штрафов (для одного занятия)**

1.	Активность на занятии	<b>10</b>	по расписанию
2.	Неподготовленное домашнее задание	-1	
3.	Пропуск занятия без уважительной причины	-2	

При реализации дисциплины (модуля) в зависимости от уровня подготовленности обучающихся могут быть использованы иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

**Таблица 12 – Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по дисциплине (модулю)**

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале	
90–100	5 (отлично)	Зачтено
85–89	4 (хорошо)	
75–84		
70–74		
65–69	3 (удовлетворительно)	
60–64	2 (неудовлетворительно)	Не зачтено
Ниже 60		

## 8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### 8.1. Основная литература:

1. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] / И.Г. Каплан. - М. : БИНОМ, 2014. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996326556.html>

(ЭБС «Консультант студента»)

2. Часовских Н.Ю., Биоинформатика : учебник / Н. Ю. Часовских. - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2020. - 352 с. - ISBN 978-5-9704-5542-5. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html> (Глава 13. Молекулярный докинг) (ЭБС «Консультант студента»)

### 8.2. Дополнительная литература:

2. Поройков В.В., Филимонов Д.А. 2001. Компьютерный прогноз биологической активности химических соединений как основа для поиска и оптимизации базовых структур новых лекарств // Азотистые гетероциклы и алкалоиды. М.: Иридиум-пресс. Т. 1. С. 123–129.

### 8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины (модуля)

**Электронная библиотечная система IPRbooks**

[www.iprbookshop.ru](http://www.iprbookshop.ru)

**Электронно-библиотечная система ВООК.ру**

<https://book.ru>

**Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги».**

[www.biblio-online.ru](http://www.biblio-online.ru), <https://urait.ru/>

**Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех»**

<https://biblio.asu.edu.ru>

*Учётная запись образовательного портала АГУ*

**Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента»**

Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретённым на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог содержит более 15 000 наименований изданий.

[www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru)

*Регистрация с компьютеров АГУ*

**Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента»**

Для кафедры восточных языков факультета иностранных языков. Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретённым на основании прямых договоров с правообладателями по направлению «Восточные языки»

[www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru)

*Регистрация с компьютеров АГУ*

**Электронно-образовательный ресурс для иностранных студентов «РУССКИЙ ЯЗЫК КАК ИНОСТРАННЫЙ»**

[www.ros-edu.ru](http://www.ros-edu.ru)

#### **Перечень общедоступных официальных интернет-ресурсов на 2022–2023 учебный год**

Наименование интернет-ресурса	Сведения о ресурсе
Единое окно доступа к образовательным ресурсам <a href="http://window.edu.ru">http://window.edu.ru</a>	Федеральный портал (предоставляется свободный доступ)
Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <a href="https://minobrnauki.gov.ru">https://minobrnauki.gov.ru</a>	
Министерство просвещения Российской Федерации <a href="https://edu.gov.ru">https://edu.gov.ru</a>	
Федеральное агентство по делам молодежи (Росмолодёжь) <a href="https://fadm.gov.ru">https://fadm.gov.ru</a>	
Федеральная служба по надзору в сфере образования и науки (Рособрнадзор) <a href="http://obrnadzor.gov.ru">http://obrnadzor.gov.ru</a>	
Сайт государственной программы Российской Федерации «Доступная среда» <a href="http://zhit-vmeste.ru">http://zhit-vmeste.ru</a>	
Российское движение школьников <a href="https://рдш.рф">https://рдш.рф</a>	

### **9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

Занятия проводятся в аудитории, снабженной: учебные столы – 10 шт., стулья – 20 шт., доска – 1 шт., компьютеры — 10 шт., лицензионное программное обеспечение: Windows SL 8 RUS OLP NL Acdmc Legalization GetGenuine (Гражданско-правовой договор №775 от «10» декабря 2012 г. с ООО «Астраханская софтверная компания»). WinPro 8 RUS Upgrd OLP NL Acdmc (Гражданско-правовой договор № 781 от «14» декабря 2012 г. с ООО

«Астраханская софтверная компания»). Microsoft Office Professional Plus 2013 (Гражданско-правовой договор № 782 от «07» декабря 2012 г. с ООО «Астраханская софтверная компания»). OfficeProPlus 2010 RUS OLP NL (Гражданско-правовой договор №775 от «10» декабря 2012 г. с ООО «Технологии будущего»). СПС «Гарант» (Гражданско-правовой договор № 32009133918 от 01 июня 2020 г. с ООО «Астрахань-Гарант-Сервис»). СПС «КонсультантПлюс» (Гражданско-правовой договор № 32009014581 от 21 апреля 2020 г. с ООО «ИЦ «КонсультантСервис»»). Kaspersky Endpoint Security (Гражданско-правовой договор № 32009135774 от 01 июня 2020 г. с ООО «5.25 Программы»). Свободно распространяемое программное обеспечение: 7-Zip (GNU Lesser General Public License, <https://www.gnu.org/licenses/lgpl.html>). Adobe Reader (GNU General Public License,

При необходимости рабочая программа дисциплины может быть адаптирована для обеспечения образовательного процесса инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, в том числе для обучения с применением дистанционных образовательных технологий. Для этого требуется заявление студента (его законного представителя) и заключение психолого-медико-педагогической комиссии (ПМПК).

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»  
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

СОГЛАСОВАНО  
Руководитель ОПОП

\_\_\_\_\_ А.В. Великородов  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 г.

УТВЕРЖДАЮ  
Заведующий кафедрой ОНФХ  
\_\_\_\_\_ А.В. Великородов

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2022 г.

**ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ**  
**в рабочей программе дисциплины (модуля)**  
**«Компьютерное моделирование физиологически активных веществ»**  
**по направлению подготовки 04.03.01 «Химия»**

**(направленность (профиль) «Медицинская и фармацевтическая химия»  
на 2022–2023 учебный год**

Форма обучения очно-заочная  
Год приёма 2020

1. В разделе 6.1. РПД Образовательные технологии вносятся следующие изменения:
  - 1.1. формы учебного занятия.
2. В раздел 6.3.1. вносятся следующие изменения:
  - 2.1. изменен перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.
3. В разделе 6.3.2. вносятся следующие изменения:
  - 3.1. изменены профессиональные базы данных и информационные справочные системы.

Составитель \_\_\_\_\_ Щепетова Е.В., к.б.н., доцент