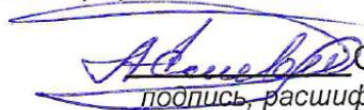


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
фармацевтической химии и фармацевтической технологии

 Сливкин А.И.
подпись, расшифровка подписи

17.05.2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.02.02 Молекулярный дизайн и механизм действия
лекарственных средств

1. Шифр и наименование направления подготовки / специальности:
33.06.01 Фармация
2. Профиль подготовки / специализация: Фармацевтическая химия,
фармакогнозия
3. Квалификация (степень) выпускника: Исследователь. Преподаватель-
исследователь
4. Форма обучения: заочная _____
5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: фармацевтической химии и
фармацевтической технологии
6. Составители программы: Сливкин А.И., д.фармац.н., проф.

7. Рекомендована: НМС фармацевтического факультета № 1500-06-05 от 26.04.2021
8. Учебный год: 2024/2025 (год поступления 2021) Семестр(ы): 7 семестр _____

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Ознакомить аспирантов, обучающихся по специальности 14.04.02 - Фармацевтическая химия, фармакогнозия с новыми направлениями, достижениями и тенденциями в области молекулярного дизайна биологических соединений.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Дисциплина относится к дисциплинам по выбору вариативной части.

Для изучения данной дисциплины аспирант должен иметь представления об основных типах органических реакций, в результате изучения данной дисциплины аспирант должен:

1. Знать основные принципы молекулярного дизайна.
2. Владеть способностью планировать молекулярный дизайн биологических активных органических соединений.
3. Иметь представление о современных тенденциях в области молекулярного моделирования и конструирования лекарственных средств.
4. Знать основные принципы и закономерности механизма действия лекарственных веществ в организме.

Данная дисциплина является предшествующей к блоку 2 (Практики), блоку 3 (научные исследования) и блоку 4 (Государственная итоговая аттестация) программы аспирантуры.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция			Планируемые результаты обучения
Код	Название		
ОПК-5	способностью и готовностью к использованию лабораторной и инструментальной базы для получения научных данных		знать: инструментальную базу, необходимую для получения научных данных уметь: использовать лабораторную и инструментальную базу для получения научных данных

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 2/72.

Форма промежуточной аттестации зачет

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		7 семестр		...
Аудиторные занятия	2	2		
в том числе:				
лекции				
практические				
ИЗ	2	2		
Самостоятельная работа	66	66		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен –	4	4		

час.)				
Итого:	72	72		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Индивидуальные занятия		
1.	Дизайн новых лекарственных средств	Методы поиска новых лекарственных средств.
2. Самостоятельная работа		
2.	Понятие и направление молекулярного дизайна	Понятие молекулярного дизайна. Типы молекулярного дизайна. Биомиметика ферментов и молекулярного узнавания. Статический и динамические подходы к молекулярному дизайну. Принципы молекулярно – динамических расчетов.
3.	Структурно-ориентированный и функционально-ориентированный дизайн	Основные тенденции и достижения структурно-ориентированного дизайна. Нитевидные молекулы, сетки, кольца, треугольники, четырехугольники.
4.	Методы моделирования пространственной структуры белка	Методы моделирования пространственной структуры белка. Распознавание фолда. Предсказание архитектурной белковой глобулы на основе знаний об атомных взаимодействиях. Инструменты молекулярного моделирования белков.
5.	Дизайн новых лекарственных средств	Методы поиска новых лекарственных средств. Принцип химического модифицирования структуры. Принцип введения фармакофорной группы. Принцип антиметаболитов. Планирование и дизайн комбиторного синтеза. Паукообразные молекулы. Дизайн молекул лекарств. Центроиды (подпорки). Основные требования к центроидам. Примеры центроидов. Высокопроизводительный скрининг. Скрининг на грануле. Клинические испытания. Методы прогнозирования биологической активности.
6.	Механизм действия лекарственных веществ	Взаимодействие лекарственного вещества с аутогенной структурой. Регуляция биотрансформации ксенобиотиков. Микросомальная система окисления, роль цитохрома P 450 Фаза конъюгации в системе обезвреживания ЛС и токсических веществ. Реакции конъюгации как синтетическая фаза обезвреживания ЛС и токсических веществ в печени. Виды конъюгации. Регуляция метаболизма этанола.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	ИЗ	Самостоятельная работа	Всего
1.	Понятие и направление молекулярного дизайна				13	13
2.	Структурно-ориентированный и функционально-				13	13

	ориентированный дизайн					
3.	Методы моделирования пространственной структуры белка				13	13
4.	Дизайн новых лекарственных средств				13	13
5.	Механизм действия лекарственных веществ			2	14	16
6.	Зачет					4
	Итого:			2	66	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Обучение складывается из контактной работы обучающихся с преподавателем, включающей аудиторные занятия (индивидуальные занятия) и самостоятельной работы.

Индивидуальные занятия подаются в форме проблемных бесед.

Самостоятельная работа студентов подразумевает самостоятельно изучение некоторых тем и включает работу с учебной, научной, справочной литературой и другими информационными источниками.

Оценка результатов самостоятельной работы организуется как единство двух форм: самоконтроль и контроль со стороны преподавателя.

Самоконтроль зависит от определенных качеств личности, ответственности за результаты своего обучения, заинтересованности в положительной оценке своего труда, материальных и моральных стимулов, от того насколько обучаемый мотивирован в достижении наилучших результатов. Задача преподавателя состоит в том, чтобы создать условия для выполнения самостоятельной работы (учебно-методическое обеспечение), повышать её значимость, и грамотно осуществлять контроль самостоятельной деятельности студента (фонд оценочных средств).

Работа с учебной литературой рассматривается как вид учебной работы по дисциплине и выполняется в пределах часов, отводимых на её изучение (в разделе СРС). Каждый обучающийся обеспечен доступом к библиотечным фондам ВГУ, а также к электронным базам данных, информационно-справочным и поисковым системам, в том числе в сети Интернет.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Хельтье, Х. -Д. Молекулярное моделирование : теория и практика / Хельтье Х. -Д. , Зиппл В. , Роньян Д. , Фолькерс Г. ; пер. с англ. - 5-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 322 с. Систем. требования: Adobe Reader XI ; экран 10". - ISBN 978-5-00101-724-0. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001017240.html

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2.	Молекулярное моделирование. Теория и практика = Molecular modeling. Basic principles and applications / Х.-Д. Хельтье [и др.] ; пер. с англ. А.А. Олиференко [и др.]; под ред. В.А. Палюлина, Е.В. Радченко .— М. :

	БИНОМ. Лаб. знаний, 2010 .— 318 с.
3.	Крыльский Д.В. Методы поиска лекарственных средств: учебное пособие/ Д.В. Крыльский, А.С. Шестаков. – Воронеж : ЛОП ВГУ, 2006. – 43 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
1.	Полнотекстовые базы данных и ресурсы, доступ к которым обеспечен из сети ВГУ (сайт научной библиотеки ВГУ, URL: http://www.lib.vsu.ru): Научная электронная библиотека РФФИ (http://elibrary.ru) Онлайн-курс Аспирантура Фармация Фармацевтическая химия и фармакогнозия https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6421 СПС "Консультант Плюс" для образования ЭБС "Консультант студента" : https://www.studentlibrary.ru

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1.	Полнотекстовые базы данных и ресурсы, доступ к которым обеспечен из сети ВГУ (сайт научной библиотеки ВГУ, URL: http://www.lib.vsu.ru): Научная электронная библиотека РФФИ (http://elibrary.ru) Онлайн-курс Аспирантура Фармация Фармацевтическая химия и фармакогнозия https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6421

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

Учебная дисциплина реализуется с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий: Онлайн-курс Аспирантура Фармация Фармацевтическая химия и фармакогнозия <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6421>

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Наименование помещений для проведения всех видов учебной деятельности, предусмотренной учебным планом, в том числе помещения для самостоятельной работы, с указанием перечня основного оборудования, учебно-наглядных пособий и используемого программного обеспечения	Адрес (местоположение) помещений для проведения всех видов учебной деятельности, предусмотренной учебным планом (в случае реализации образовательной программы в сетевой форме дополнительно указывается наименование организации, с которой заключен договор)
Помещение для проведения индивидуальных занятий, специализированная мебель, ноутбук с возможностью подключения к сети "Интернет", мультимедийный проектор, экран ПО WinPro 8, OfficeSTD, LibreOffice 7.1, Mozilla Firefox	394036, г. Воронеж, ул. Студенческая, д. 3

Помещение для самостоятельной работы Специализированная мебель, компьютеры (12 шт.), доска магнитно-маркерная . ПО: WinPro 8, OfficeSTD 2013 RUS OLP NL Acdmc, LibreOffice 7.1, Mozilla Firefox, СПС «ГАРАНТ-Образование», СПС «Консультант Плюс» для образования.	394036, г. Воронеж, ул. Студенческая, д. 3
--	--

19. Фонд оценочных средств:

19.1 Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС* (средства оценивания)
ОПК-4	знать: фармакопейные и нефармакопейные методы анализа лекарственных средств и лекарственного растительного сырья; внутри и межлабораторный контроль	Тема 1-5	комплект КИМ
	уметь: валидировать разработанную методику и внедрять ее в анализ лекарственных средств и лекарственного растительного сырья	Тема 1-5	комплект КИМ
Промежуточная аттестация			КИМ

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Для оценивания результатов обучения на текущей аттестации используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенции	Шкала оценок
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины), способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом данной области науки (теоретическими основами дисциплины),	Базовый уровень	Хорошо

способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, допускает ошибки при ответе на некоторые вопросы.		
Обучающийся владеет частично теоретическими основами дисциплины, фрагментарно способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, не умеет применять полученные знания. Не владеет понятийным аппаратом по предмету.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся не владеет теоретическими основами дисциплины, не способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, не умеет применять полученные знания. Не владеет понятийным аппаратом по предмету. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	Неудовлетворительно

Для оценивания результатов обучения на зачете используется – зачтено, не зачтено
Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Полное знание учебного материала, предусмотренного рабочей программой. Ответ обоснован, аргументирован. Допускаются незначительные ошибки, неточности, которые аспирант исправляет после замечаний преподавателя.	Базовый уровень	Зачтено
Знания несистематические, отрывочные. В ответах допущены грубые, принципиальные ошибки. Затруднения в формулировании основных определений, при решении задач, которые не устранены после наводящих вопросов. Обучающийся отказался от ответа.	–	Не зачтено

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к текущей аттестации:

1. Понятие молекулярного дизайна. Типы молекулярного дизайна.
2. Высокопроизводительный скрининг. Скрининг на грануле.
3. Биомиметика ферментов и молекулярного узнавания.
4. Планирование и дизайн комбинаторного синтеза.
5. Принципы молекулярно-динамических расчетов.
6. Основные тенденции и достижения структурно-ориентированного дизайна.
7. Паукообразные молекулы. Дизайн молекул лекарств.
8. Методы моделирования пространственной структуры белка.
9. Функционально-ориентированный дизайн.
10. Основные требования к центроидам. Примеры центроидов.

19.3.2 Перечень вопросов к зачету:

11. Понятие молекулярного дизайна. Типы молекулярного дизайна.
12. Высокопроизводительный скрининг. Скрининг на грануле.
13. Биомиметика ферментов и молекулярного узнавания.
14. Планирование и дизайн комбинаторного синтеза.
15. Принципы молекулярно-динамических расчетов.
16. Основные тенденции и достижения структурно-ориентированного дизайна.
17. Паукообразные молекулы. Дизайн молекул лекарств.
18. Методы моделирования пространственной структуры белка.
19. Функционально-ориентированный дизайн.
20. Основные требования к центроидам. Примеры центроидов.
21. Дизайн и создание молекулярных сосудов.
22. Инструменты молекулярного моделирования белков.
23. Регуляция биотрансформации лекарственных средств, ксенобиотиков.
24. Принцип взаимодействия лекарственного вещества с аутогенной структурой.

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме индивидуального опроса.

Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и практические задания, позволяющие оценить степень сформированности умений и навыков.

При оценивании используются количественные или качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.