

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой  
органической химии



Шихалиев Х.С.  
подпись, расшифровка подписи  
17.06.2021 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Б1.В.05 Химия биологически активных соединений**

*Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом*

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация:

Органическая химия

3. Квалификация выпускника: магистр

4. Форма обучения: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: кафедра органической химии

6. Составители программы: Крысин Михаил Юрьевич, д.х.н., доцент

*(ФИО, ученая степень, ученое звание)*

7. Рекомендована:

Научно-методическим Советом химического факультета, 17.06.2021, протокол №5  
*(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола,*

*отметки о продлении вносятся вручную)*

8. Учебный год: 2022-2023

Семестр(ы): 3

## 9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целью освоения учебной дисциплины является:

ознакомление магистрантов, обучающихся по направлению 04.04.01 «Химия», с новыми направлениями, достижениями и тенденциями в области молекулярного дизайна биологически активных соединений

Задачи учебной дисциплины:

- знание основных принципов молекулярного дизайна;
- овладение способностью планирования молекулярного дизайна биологически активных органических соединений
- иметь представление о современных тенденциях в области молекулярного моделирования и конструирования лекарственных средств

## 10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

часть, формируемая участниками образовательных отношений блока Б1.

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

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПКВ -1	Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности	ПКВ -1.1	Обеспечивает сбор научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач	<b>Знать:</b> основные принципы молекулярного дизайна. <b>Уметь:</b> выбирать критерии поиска научной, технической и патентной информации в соответствии с поставленной задачей исследования. <b>Владеть:</b> навыками сбора, анализа и обработки научно-технической информации в области молекулярного дизайна биологически активных веществ.
		ПКВ -1.2	Составляет аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта	
ПКВ -3	Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области органической химии	ПКВ -3.1	Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	<b>Знать:</b> современные направления молекулярного дизайна биологически активных соединений. <b>Уметь:</b> систематизировать и сопоставлять экспериментальные и литературные данные в соответствии с поставленной исследовательской задачей. <b>Владеть:</b> навыками анализа полученных результатов для определения и выбора перспективных направлений развития работ и практического применения
		ПКВ -3.2	Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	

## 12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 7/252.

### 13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость	
		Всего	По семестрам
			3 семестр
Аудиторные занятия		74	74
в том числе:	лекции	18	18
	практические	18	18
	лабораторные	38	38
Самостоятельная работа		178	178
Форма промежуточной аттестации (экзамен)			
Итого:		252	252

#### 13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
<b>1. Лекции</b>			
1.1	Понятие и направления молекулярного дизайна	Понятие молекулярного дизайна. Типы молекулярного дизайна. Биомиметика ферментов и молекулярного узнавания. Статический и динамический подходы к молекулярному дизайну. Принципы молекулярно-динамических расчетов.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
1.2	Структурно-ориентированный и функционально-ориентированный дизайн	Основные тенденции и достижения структурно-ориентированного дизайна. Нитевидные молекулы, сетки, кольца, треугольники, четырехугольники, полиэдраны, цепи, пустотелы сферы, древовидные молекулы. Проектирование новой структуры. Дизайн и создание молекулярных сосудов	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
1.3	Методы моделирования пространственной структуры белка	Методы моделирования пространственной структуры белка. Распознавание фолда. Предсказание архитектуры белковой глобулы на основе знаний об атомных взаимодействиях. Моделирование по гомологии. Инструменты молекулярного моделирования белков.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
1.4	Дизайн новых лекарственных средств	Методы поиска новых лекарственных средств. Принцип химического модифицирования структуры. Принцип введения фармакофорной группы. Принцип антиметаболитов. Планирование и дизайн комбинаторного синтеза. Паукообразные молекулы. Дизайн молекул лекарств. Центроиды (подпорки). Основные требования к центроидам. Примеры	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>

		центроидов. Высокопроизводительный скрининг. Скрининг на грануле. Клинические испытания. Методы прогнозирования биологической активности.	
<b>2. Практические занятия</b>			
2.1	Понятие и направления молекулярного дизайна	Принципы молекулярного дизайна. Статический и динамический подходы к молекулярному дизайну.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
2.2	Структурно-ориентированный и функционально-ориентированный дизайн	Дизайн сфокусированных и диверсифицированных библиотек химических соединений	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
2.3	Методы моделирования пространственной структуры белка	Методы моделирования пространственной структуры белка. Распознавание фолда. Предсказание архитектуры белковой глобулы на основе знаний об атомных взаимодействиях. Моделирование по гомологии. Инструменты молекулярного моделирования белков.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
2.4	Дизайн новых лекарственных средств	Планирование молекулярного дизайна биологически активных органических соединений	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
<b>3. Лабораторные занятия</b>			
3.1	Понятие и направления молекулярного дизайна	Типы молекулярного дизайна. Статический и динамический подходы к молекулярному дизайну. Принципы молекулярно-динамических расчетов.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
3.2	Структурно-ориентированный и функционально-ориентированный дизайн	Дизайн сфокусированных и диверсифицированных библиотек химических соединений	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
3.3	Методы моделирования пространственной структуры белка	Методы моделирования пространственной структуры белка. Распознавание фолда. Предсказание архитектуры белковой глобулы на основе знаний об атомных взаимодействиях. Моделирование по гомологии. Инструменты молекулярного моделирования белков.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>
3.4	Дизайн новых лекарственных средств	Формирование библиотек химических соединений для виртуального скрининга с использованием типичных фильтров лекарствоводия, лидероподобия, QSAR-моделей.	<a href="https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885">https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=11885</a>

### 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практически е	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Понятие и направления молекулярного дизайна	2	2	8	35	47
2	Структурно-ориентированный и функционально-ориентированный	6	6	12	35	59

	дизайн					
3	Методы моделирования пространственной структуры белка	4	4	8	40	56
4	Дизайн новых лекарственных средств	6	6	10	68	90
	Итого:	18	18	38	178	252

#### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Организация изучения дисциплины предполагает следующие виды работ студентов: с конспектами лекций; выполнение заданий преподавателя при подготовке к занятиям по наиболее сложным разделам дисциплины с использованием основной и дополнительной литературы, а также интернет-ресурсов.

##### Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа как форма организации учебной работы предусматривает следующие ее виды:

- повторение лекционного материала;
- изучение учебной, учебно-методической литературы и иных источников по инструментальным методам анализа и их применению;
- подготовка к зачету с оценкой.

Цель самостоятельной работы – это углубление и расширение знаний в области физико-химических методов анализа органических веществ; формирование навыка и интереса к самостоятельной познавательной деятельности, что послужит в будущем основанием для написания выпускной квалификационной работы.

В процессе изучения курса необходимо обратить внимание на самоконтроль знаний. С этой целью обучающийся после изучения каждой отдельной темы и затем всего курса по учебнику и дополнительной литературе должен проверить уровень своих знаний с помощью контрольных вопросов, которые помещены в конце каждой темы.

Для самостоятельного изучения отводятся темы, хорошо разработанные в учебных пособиях, научных монографиях и не могут представлять особенных трудностей при изучении.

Самостоятельная работа реализуется: непосредственно в процессе аудиторных занятий на кафедре при выполнении лабораторных работ; в библиотеке, дома.

##### Методические рекомендации по подготовке к экзамену

При подготовке к экзамену обучающийся должен повторить пройденный материал в соответствии с учебной программой, примерным перечнем учебных вопросов, выносящихся на зачет и содержащихся в данной программе, используя конспект лекций и рекомендованную литературу. При необходимости может обратиться за консультацией и методической помощью к преподавателю.

#### 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	Дрюк В. Г., Скляр С. И., Карцев В. Г. - БИОЛОГИЧЕСКАЯ ХИМИЯ 2-е изд., пер. и доп. Учебное пособие для бакалавриата, специалитета и магистратуры - М.:Издательство Юрайт - 2019 - 311с. - ISBN: 978-5-534-08504-4 - Текст электронный // ЭБС ЮРАЙТ - URL: <a href="https://urait.ru/book/biologicheskaya-himiya-442129">https://urait.ru/book/biologicheskaya-himiya-442129</a>
2	Молекулярное моделирование: теория и практика [Электронный ресурс] / Хельтье Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г.; пер. с англ. - 5-е изд. - М. : Лаборатория знаний, 2020. Режим доступа: <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001017240.htm">https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001017240.htm</a>

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Погребняк А. В. Молекулярное моделирование и дизайн биологически активных веществ / А. В. Погребняк. – Ростов-н /Д : Издательство СКН ЦВШ , 2003. – 230 с.
4	Юровская, М. А. Основы органической химии : учебное пособие / М. А. Юровская, А. В. Куркин. — 4-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 239 с. — ISBN 978-5-00101-757-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/135515">https://e.lanbook.com/book/135515</a>

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

№ п/п	Ресурс
5	Сайт Зональной Научной библиотеки Воронежского государственного университета. —Режим доступа: <a href="http://www.lib.vsu.ru">http://www.lib.vsu.ru</a>
6	ЭБС «Университетская библиотека online», <a href="http://biblioclub.ru/">http://biblioclub.ru/</a>
7	ЭБС «Консультант студента», <a href="http://www.studmedlib.ru">http://www.studmedlib.ru</a>
8	Электронно-библиотечная система "Лань" <a href="https://e.lanbook.com/">https://e.lanbook.com/</a>

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

№ п/п	Источник
1	Крыльский Д.В. Методы поиска новых лекарственных средств: учебное пособие / Д.В. Крыльский, А.С. Шестаков. – Воронеж : ЛОП ВГУ, 2006. – 43 с.

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

**18.** При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения (ЭО) и дистанционные образовательные технологии (ДОТ) в части освоения лекционного материала, проведения текущей и промежуточной аттестации, проведения части лабораторных работ и самостоятельной работы обучающихся по дисциплине, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров. Для освоения дисциплины рекомендуется список литературы и ресурсы для электронного обучения (ЭО) (п. 15).

Для достижения цели освоения учебной дисциплины, повышения качества образования и формирования компетенций используются аудиторные (лекции, лабораторные, практические) и внеаудиторные/интерактивные (самостоятельная работа студентов) формы обучения.

**Аудиторные:**

Основными видами аудиторной работы являются лекции, практические и лабораторные работы. Они решают задачи формирования и развития профессиональных умений и навыков обучающихся.

*Лекции* включают в себя последовательное изложение материала преподавателем

в том числе с использованием мультимедийного проектора для компьютерной презентации и видеоматериалов.

*Лабораторные работы* – форма организации обучения, интегрирующая теоретико-методологические знания, практические умения и навыки студентов в едином процессе учебно-исследовательского характера.

В ходе выполнения лабораторных работ студенты вырабатывают умения анализировать, делать выводы и обобщения, пользоваться различными методами молекулярного дизайна, оформлять результаты экспериментов.

*Практические работы* – форма организации обучения, интегрирующая теоретико-методологические знания, практические умения и навыки студентов в едином процессе учебно-исследовательского характера.

В ходе выполнения практических заданий студенты вырабатывают умения анализировать, делать выводы и обобщения для решения конкретных научно-исследовательских задач.

*Внеаудиторные:*

Работа в глобальной сети (использование Интернет-технологий), поиск научной и методической информации.

#### **19. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

Специализированная мебель, шкаф вытяжной, лабораторные приборы, оборудование, посуда для синтеза и исследования органических соединений, аквадистиллятор ДЭ-10, баня водяная LB-140, весы аналитические HTR-220 CE Shinko VIBRA, комплекс для испарения жидкостей, микроскоп медицинский Биомед-6 (трино), цифровая камера ТС-1.3, рефрактометр ИРФ-454 Б2М, принтер лазерный Samsung ML-1641, ноутбук, ГХ-масс-спектрометр, ВЭЖХ-масс-спектрометр

#### **19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций**

По решению кафедры оценки экзамен могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре, но не ранее, чем на заключительном занятии. При несогласии студента с оценкой последний вправе сдавать экзамен на общих основаниях.

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Понятие и направления молекулярного дизайна	ПКВ-1	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2	Устный опрос
2.	Структурно-ориентированный и функционально-ориентированный дизайн	ПКВ-1 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	Устный опрос;
3.	Методы моделирования пространственной структуры белка	ПКВ-1 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	Устный опрос

4.	Дизайн новых лекарственных средств	ПКВ-1 ПКВ-3	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-3.1 ПКВ-3.2	Устный опрос;
Промежуточная аттестация форма контроля – экзамен				Перечень вопросов

## 20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

### 20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Лабораторные работы

#### Примерный перечень лабораторных работ:

- «Молекулярный дизайн ингибиторов протеинкиназ»
- «Молекулярный дизайн ингибиторов главной протеазы SARS-CoV-2»
- «Молекулярный дизайн ингибиторов факторов свертываемости крови»
- «Молекулярный дизайн ковалентных ингибиторов в онкологии»
- «Молекулярный дизайн пептидомиметиков»

#### Описание технологии проведения

Лабораторные работы включают самостоятельную проработку теоретического материала обучающимся, изучение методик проведения и планирование эксперимента, освоение измерительных средств, обработку и интерпретацию экспериментальных данных.

При защите лабораторной работы (сдаче отчета о ее выполнении) обучающийся должен уметь объяснять цели, задачи, ход проведения работы, ее результаты, сделанные выводы, а также основные конструктивные особенности используемого оборудования.

#### Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

#### Критерии оценки лабораторной работы

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
<i>Обучающийся владеет теоретическими основами методов анализа, лабораторная работа выполнена, сделаны правильные наблюдения и выводы (допускаются некоторые малосущественные ошибки, которые студент обнаруживает и быстро исправляет самостоятельно или при помощи преподавателем), что соответствует освоению компетенций.</i>	<i>Повышенный уровень Базовый уровень Пороговый уровень</i>	<i>Зачтено</i>
<i>Обучающийся не знает методики выполнения практической работы и ее теоретических основ, не может самостоятельно провести исследование, делает грубые ошибки в интерпретации полученных результатов, не может сформулировать выводы, оформить работу, что соответствует не освоению компетенций.</i>	–	<i>Не зачтено</i>

### 20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к экзамену

#### Перечень вопросов к экзамену:

1. Понятие молекулярного дизайна. Типы молекулярного дизайна
2. Высокопроизводительный скрининг.
3. Основные тенденции и достижения структурно-ориентированного дизайна
4. Скрининг на грануле
5. Методы моделирования пространственной структуры белка.
6. Клинические испытания.
7. Распознавание фолда. Предсказание архитектуры белковой глобулы на основе знаний об атомных взаимодействиях
8. Методы прогнозирования биологической активности
9. Методы поиска новых лекарственных средств.
10. Биомиметика ферментов и молекулярного узнавания.
11. Принцип введения фармакофорной группы.
12. Дизайн и создание молекулярных сосудов
13. Принцип антиметаболитов
14. Моделирование по гомологии
15. Планирование и дизайн комбинаторного синтеза.
16. Принципы молекулярно-динамических расчетов
17. Паукообразные молекулы. Дизайн молекул лекарств. Центроиды (подпорки). Основные требования к центроидам. Примеры центроидов.
18. Инструменты молекулярного моделирования белков

#### Описание технологии проведения

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, позволяющие оценить степень сформированности умений.

#### Технология проведения экзамена

1. Выдача билетов к экзамену и чистых листов ответов. (Билеты к зачету с оценкой выдаются обучающимся индивидуально).
2. Фиксирование времени начала и доведение до студентов времени окончания экзамена.
3. Ответы обучающихся на билеты к экзамену в письменном виде с заполнением листов ответов. (При необходимости в них кроме текста приводятся рисунки, схемы, таблицы, диаграммы).
4. Сбор билетов к экзамену и листов ответов.
5. Проверка листов ответов и выставление оценок.

Во время экзамена обучающимся запрещается разговаривать, ходить по аудитории, пользоваться сотовыми телефонами, шпаргалками, конспектами, учебниками и другой учебно-методической литературой, а также вносить пометки в экзаменационные билеты. Студенты, нарушившие перечисленные требования, удаляются с экзамена.

#### Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

При оценивании результатов обучения на экзамене используются следующие показатели:

- 1) знание учебного материала дисциплины;
- 2) умение применять теоретические знания для решения практических задач;
- 3) владение теоретическими основами дисциплины, способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

Для оценивания результатов обучения на экзамене используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Показатели достижения заданного уровня освоения компетенции:

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности	Шкала оценок
---------------------------------	--------------------------	--------------

	компетенций	
Обучающийся в полной мере владеет понятийным аппаратом дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач	Повышенный уровень	Отлично
Обучающийся владеет понятийным аппаратом дисциплины, но допускает отдельные ошибки при ответах на вопросы.	Базовый уровень	Хорошо
Обучающийся частично владеет теоретическими основами дисциплины, не умеет применять теоретические знания для решения практических задач.	Пороговый уровень	Удовлетворительно
Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.	–	Неудовлетворительно