

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

Переутверждено на 2018/2019 уч. год  
кафедрой органической химии  
(протокол № 1003-8 от 31.08.2018)

Зав. кафедрой X. С. Шихалиев

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой  
органической химии  
(X.С. Шихалиев)

X. С. Шихалиев  
01.09.2017 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**М1.В.ОД.4 Химия биологически активных соединений**

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:**  
04.04.01 Химия
- 2. Профиль подготовки/специализация:** химия природных соединений
- 3. Квалификация (степень) выпускника:** магистр
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра органической химии
- 6. Составители программы:** Крысин Михаил Юрьевич, доктор химических наук, доцент
- 7. Рекомендована:** научно-методическим советом химического факультета, протокол № 6 от 26.06.2017
- 8. Учебный год:** 2017-2018 **Семестр(ы):** 3

### 9. Цели и задачи учебной дисциплины:

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

### 10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина относится к вариативной части, обязательные дисциплины.

### 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-2	Владение современными компьютерными технологиями планировании исследований, получение и обработка результатов научных экспериментов, сбор, обработка, хранение, представления в передаче научной информации	<b>знать:</b> основные принципы молекулярного дизайна; <b>уметь:</b> планировать молекулярный дизайн биологически активных органических соединений; <b>владеть:</b> представлениями о современных тенденциях в области молекулярного моделирования и конструирования лекарственных средств

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

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

### 13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)	
	Всего	3 семестр
Аудиторные занятия	36	36
в том числе:		
лекции	-	-
практические	18	18
лабораторные	18	18
Самостоятельная работа и контроль	216	216
Итого:	252	252
Форма промежуточной аттестации		Экзамен

#### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
<b>1. Лекции</b>		
<b>2. Лабораторные занятия</b>		
2.1	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.
2.2	Структурно-	Основные тенденции и достижения структурно-

	ориентированный и функционально-ориентированный дизайн	ориентированного дизайна. Нитевидные молекулы, сетки, кольца, треугольники, четырехугольники, полиэдраны, цепи, пустотелы сферы,древовидные молекулы. Проектирование новой структуры. Дизайн и создание молекулярных сосудов
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.
2.4	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 центроидов. Высокопроизводительный скрининг. Скрининг на грануле. Клинические испытания. Методы прогнозирования биологической активности.
<b>3. Практические</b>		
3.1	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.
3.2	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
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.
3.4	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 центроидов. Высокопроизводительный скрининг. Скрининг на грануле. Клинические испытания. Методы прогнозирования биологической активности.

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

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1	Понятие и направления молекулярного дизайна		4	4	54	62
2	Структурно-ориентированный и функционально-ориентированный дизайн		4	4	54	62
3	Методы моделирования пространственной структуры белка		4	4	54	62
4	Дизайн новых лекарственных средств		6	6	54	66
Итого:			18	18	216	252

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

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- решение задач;

#### 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. Молекулярное моделирование. Теория и практика / Х. Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. - М. : БИНОМ Лаб. знаний, 2010. - 318 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Погребняк А.В. Молекулярное моделирование и дизайн биологически активных веществ / А.В. Погребняк. – Ростов-н /Д : Издательство СКН ЦВШ, 2003. – 230 с.
3	Крыльский Д.В. Методы поиска новых лекарственных средств: учебное пособие / Д.В. Крыльский, А.С. Шестаков. – Воронеж : ЛОП ВГУ, 2006. – 43 с.
4	Соколов Ю.А. Прогнозирование биологической активности соединений с использованием квантово-механических методов / Ю.А. Соколов. – Минск : Белорусская наука, 2008. – 308 с.
5	Машковский М.Д. Лекарственные средства: в 2 ч / М.Д. Машковский. – М. : Медицина, 2001. – Ч. 1. - 539 с.
6	Машковский М.Д. Лекарственные средства: в 2 ч / М.Д. Машковский. – М. : Медицина, 2001. – Ч. 2. - 608 с.
7	Граник В.Г. Лекарства. Фармакологический, биохимический и химический аспекты / В.Г. Граник. - М. : Вузовская книга, 2001. - 408 с.
8	Солдатенков А.Т. Основы органической химии лекарственных средств / А.Т. Солдатенков, Н.М. Колядина, Н.В. Шендик. – М. : Химия, 2001. – 192 с.

в) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

№ п/п	Источник
9	American Chemical Society ACS Publications - полнотекстовая база данных научных журналов, <a href="http://pubs.acs.org">http://pubs.acs.org</a>
10	John Wiley & Sons Wiley Online Library - полнотекстовая база данных научных журналов, <a href="http://www.interscience.wiley.com">http://www.interscience.wiley.com</a>
11	Springer (платформа SpringerLink) SpringerLink - полнотекстовая база данных научных журналов, <a href="http://www.springerlink.com">http://www.springerlink.com</a>
12	Royal Society of Chemistry The Royal Society of Chemistry (RSC) - полнотекстовая база данных научных журналов, <a href="http://www.rsc.org/Publishing/Journals/Index.asp">http://www.rsc.org/Publishing/Journals/Index.asp</a>

#### 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	Современные методы синтеза гетероциклических соединений : учебно-методическое пособие для вузов / сост. : Х.С. Шихалиев, М.Ю. Крысин, Н.В. Столповская, А.В. Зорина. — Воронеж : Издательско-полиграфический центр Научная книга, 2012. — 21 с.

#### 17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

## 18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Компьютер и мультимедийные установки.

## 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-2 Владение современными компьютерными технологиями планировании исследований, получение и обработка результатов научных экспериментов, сбор, обработка, хранение, представления в передаче научной информации	Знать: основные принципы молекулярного дизайна.	Принципы молекулярного дизайна	Устный опрос
	Уметь: планировать молекулярный дизайн биологически активных органических соединений.	Планирование молекулярный дизайн биологически активных органических соединений	Устный опрос
	Владеть: представлениями о современных тенденциях в области молекулярного моделирования и конструирования лекарственных средств.	Современные тенденции в области молекулярного моделирования и конструирования лекарственных средств.	Устный опрос
Промежуточная аттестация			КИМ

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

- 1) знание основных принципов молекулярного дизайна;
- 2) знание методов структурно-ориентированного дизайна;
- 3) знание методов моделирования пространственной структуры белка;
- 4) знание методов поиска новых лекарственных средств;
- 5) владение способностью иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований.

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

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
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

### **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 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

#### **19.3.2 Перечень практических заданий**

#### **19.3.3 Тестовые задания**

#### **19.3.4 Перечень заданий для контрольных работ**

#### **19.3.5 Темы курсовых работ**

#### **19.3.6 Темы рефератов**

### **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 устного опроса, решения задач, тестирования. 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.

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