Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич
 Должность: исполняющий обязанности ректора
 Дата подписания: 25.01.2022 13:57:02
 Уникальный программный ключ:
 4f6042f2120818235a607103646473693807ac0

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.2.2 Молекулярный дизайн биологически активных веществ

Уровень образования: высшее образование – уровень подготовки кадров высшей квалификации
ОПОП ВО: программа подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (программа аспирантуры)

Направление подготовки: 33.06.01 Фармация

Направленность (профиль) программы: Фармацевтическая химия, фармакогнозия

<p>Формируемые компетенции</p>	<p>ПК-1 Способность и готовность к организации и проведению научных исследований по получению и изучению свойств биологически активных веществ на основе направленного изменения структуры веществ синтетического и (или) природного происхождения или выделения из растительного сырья и (или) проведению анализа и контроля качества лекарственных средств синтетического и (или) природного происхождения, лекарственного растительного сырья и лекарственных форм на его основе</p> <p>ПК-1.1 Осваивает способы получения и изучения свойств биологически активных веществ на основе направленного изменения структуры веществ синтетического и природного происхождения и выделения из растительного сырья, методы анализа и контроля качества лекарственных средств синтетического и природного происхождения, лекарственного растительного сырья и лекарственных форм на его основе</p> <p>на уровне знаний: - знать новые направления в поиске, создании, анализе биологически активных веществ</p>																																																												
<p>Место дисциплины в структуре ОПОП ВО</p>	<p>Вариативная часть. Дисциплина по выбору, направленная в том числе на подготовку к сдаче кандидатского экзамена. Изучается на 3 курсе, в 5 семестре.</p>																																																												
<p>Объем дисциплины, распределение часов по курсам, общая трудоемкость, формы контроля</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th rowspan="3">Вид занятий</th> <th colspan="6">Курсы, семестры</th> <th rowspan="3">Итого</th> </tr> <tr> <th colspan="2">1</th> <th colspan="2">2</th> <th colspan="2">3</th> </tr> <tr> <th>1</th> <th>2</th> <th>3</th> <th>4</th> <th>5</th> <th>6</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Лекции</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>12</td> <td></td> <td>12</td> </tr> <tr> <td>Практич. занятия</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>16</td> <td></td> <td>16</td> </tr> <tr> <td>Самост. работа</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>76</td> <td></td> <td>76</td> </tr> <tr> <td>Промежуточная аттестация (зачет)</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>4</td> <td></td> <td>4</td> </tr> <tr> <td>Итого</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td> <td>108</td> <td></td> <td>108</td> </tr> </tbody> </table>	Вид занятий	Курсы, семестры						Итого	1		2		3		1	2	3	4	5	6	Лекции					12		12	Практич. занятия					16		16	Самост. работа					76		76	Промежуточная аттестация (зачет)					4		4	Итого					108		108
Вид занятий	Курсы, семестры						Итого																																																						
	1		2		3																																																								
	1	2	3	4	5	6																																																							
Лекции					12		12																																																						
Практич. занятия					16		16																																																						
Самост. работа					76		76																																																						
Промежуточная аттестация (зачет)					4		4																																																						
Итого					108		108																																																						
<p>Основные разделы и (или) темы дисциплины</p>	<p>Раздел 1. Основные направления молекулярного дизайна биологически активных веществ (БАВ).</p> <p>Тема 1.1. Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАВ. Подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры. Понятия и цели молекулярного дизайна БАВ. Оценка биологической активности программой PASS online (виртуальный скрининг).</p> <p>Тема 1.2. Квантово-химические расчёты и множественный регрессионный анализ в моделировании молекул БАВ.</p>																																																												

	<p>Тема 1.3. Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка. Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ.</p> <p>Тема 1.4. Построение структур БАВ с заданными свойствами. Правило Липински. Построение структур БАВ с заданными свойствами. Основные положения: структурные дескрипторы; константа липофильности; молекулярная масса; константа кислотности и основности; доноры водородной связи; акцепторы водородной связи.</p> <p>Тема 1.5. Молекулярный докинг. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus). Молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2, гидролаза E.Coli(S.Aureus). Анализ результатов докинга.</p> <p>Раздел 2. Практические аспекты молекулярного дизайна БАВ.</p> <p>Тема 2.1. Модели качественного поиска БАВ. Способы создания, оценка и валидация.</p> <p>Тема 2.2. Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация.</p> <p>Тема 2.3. Способ поиска БАВ методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг).</p> <p>Тема 2.4. Количественное прогнозирование биологической активности БАВ с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ.</p>
Оценочные средства	<p>Текущий контроль: реферат, доклад, опрос.</p> <p>Промежуточная аттестация: портфолио.</p>