

Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич
 Должность: Ректор
 Дата подписания: 29.11.2023 13:06:34
 Уникальный программный ключ:
 d56ba43a9b0e5c64a319e1c3a83b02c0dbb40af0

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.2.2 Организация и методика доклинических испытаний

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

Направление подготовки: 30.06.01 Фундаментальная медицина

Направленность (профиль) программы: Фармакология, клиническая фармакология

Формируемые компетенции	ПК-1 Способность к поиску новых биологически активных фармакологических веществ и исследование зависимости «структура– активность» среди природных и впервые синтезированных соединений на экспериментальных моделях патологических состояний ПК-1.1 Проводит экспериментальное изучение специфической активности и безопасности фармакологических веществ, включающее изучение токсичности в условиях острых и хронических патологических состояний на уровне знаний: - знать новые направления в изучении специфической активности и безопасности фармакологических веществ, в том числе токсичности, в условиях острых и хронических патологических состояний - знать новые направления в поиске, создании, анализе биологически активных веществ																																																																		
Место дисциплины в структуре ОПОП ВО	Вариативная часть. Дисциплина по выбору, направленная в том числе на подготовку к сдаче кандидатского экзамена. Изучается на 3 курсе, в 5 семестре.																																																																		
Объем дисциплины, распределение часов по курсам, общая трудоемкость, формы контроля	<table><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><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></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																																																												
Основные разделы и (или) темы дисциплины	Раздел 1. Основные направления молекулярного дизайна биологически активных веществ (БАВ). 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). Тема 1.2. Квантово-химические расчёты и множественный регрессионный анализ в моделировании молекул БАВ. Тема 1.3. Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка.																																																																		

	Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ. 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. 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. Раздел 2. Практические аспекты молекулярного дизайна БАВ. Тема 2.1. Модели качественного поиска БАВ. Способы создания, оценка и валидация. Тема 2.2. Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация. Тема 2.3. Способ поиска БАВ методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг). Тема 2.4. Количественное прогнозирование биологической активности БАВ с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ.
Оценочные средства	Текущий контроль: реферат, доклад, опрос. Промежуточная аттестация: портфолио.