

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич
Должность: исполняющий обязанности ректора
Дата подписания: 08.02.2022 16:09:32
Уникальный программный ключ:
4f6042f92f26818253a667205646475b93807ac6

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.3.1.Молекулярный дизайн биологически активных веществ

~~Код и наименование направления~~ подготовки, профиля: 19.03.01 Биотехнология.

Фармацевтическая биотехнология.

Квалификация (степень) выпускника: бакалавр.

Форма обучения: очная.

Формируемые компетенции:

Дисциплина по выбору Б1.В.ДВ.3.1. «Молекулярный дизайн биологически активных веществ» обеспечивает овладение следующими компетенциями: ОПК-3 – способность использовать знания о современной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества для понимания окружающего мира и явлений природы, формируется данной дисциплиной частично;

ПК-1 – способность осуществлять технологический процесс в соответствии с регламентом и использовать технические средства для измерения основных параметров биотехнологических процессов, свойств сырья и продукции, формируется данной дисциплиной частично.

В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть:

ОПК-3

– сформированы знания: о новых направлениях молекулярного дизайна БАВ, современных особенностях эффективного проведения научно-исследовательской работы, способы их применения с целью проведения молекулярного дизайна;

– сформированы умения: обосновывать актуальность и анализировать стратегические задачи в сфере молекулярного дизайна БАВ;

– сформированы навыки: определения практической значимости избранной темы научного исследования; навыками определения физических констант, использования спектроскопических и др. методов изучения свойств веществ.

ПК-1

– сформированы знания: об этапах проведения и планирования экспериментов и использования автоматизированных систем;

– сформированы умения: анализировать информацию об объектах и предметах исследования, планировать и моделировать эксперименты, осуществлять статистическое управление процессами, давать практическую оценку технического уровня и эффективности исследования;

– сформированы навыки: владения научными подходами к выполнению исследовательской работы с учетом использования современных инновационных технологий.

Объем и место дисциплины в структуре ОПОП: дисциплина по выбору Б1.В.ДВ.3.1. «Молекулярный дизайн биологически активных веществ» относится к вариативной части ОПОП, проводится в 5 семестре 3 курса, общая трудоемкость дисциплины –144 часа / 4 зачётные единицы (з. е.). Количество академических часов, выделенных на контактную работу с преподавателем – 76 часов по видам, из них лекции – 20 часов, практические занятия – 56 часов; на самостоятельную работу обучающихся – 68 часов. Форма промежуточной аттестации в соответствии с учебным планом: зачёт.

План 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. Включает понятия и цели молекулярного дизайна БАВ, подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры.

Тема 1.2. Оценка биологической активности программой PASS online (виртуальный скрининг). Изучает оценку биологической активности БАВ программой PASS online. Включает проведение виртуального скрининга программой PASS.

Тема 1.3. Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАВ. Включает в себя изучение типов компьютерных программ для квантово-химических расчётов и проведение квантово-химических расчётов в моделировании молекул БАВ.

Тема 1.4. Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАВ. Включает в себя изучение компьютерных программ для проведения множественного регрессионного анализа и использование множественного регрессионного анализа в моделировании структур БАВ.

Тема 1.5. Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка. Изучаются методы построения количественных соотношений «структура-свойство».

Тема 1.6. Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ. Рассматривает компьютерные программы для расчёта констант липофильности и ионизации.

Тема 1.7. Построение структур БАВ с заданными свойствами. Правило Липински. В теме рассматривается построение структур БАВ с заданными свойствами и правило Липински.

Тема 1.8. Молекулярный докинг. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus). Тема включает в себя молекулярный докинг, понятие и определение и использование для докинга «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus).

Тема 1.9. Молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга. Изучается молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2) и анализ результатов докинга.

Тема 1.10. Молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга. Рассматривает молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)2) и анализ результатов докинга.

Раздел 2. Практические аспекты молекулярного дизайна БАВ.

Тема 2.1. Модели качественного поиска БАВ. Способы создания, оценка и валидация. В теме изучаются модели качественного поиска БАВ, способы их создания, оценка и валидация.

Тема 2.2. Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация. Тема изучает модели количественного поиска БАВ, способы их создания, оценка и валидация.

Тема 2.3. Способ поиска БАВ методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг). Рассматривается способ поиска БАВ методом молекулярного докинга.

Тема 2.4. Количественное прогнозирование биологической активности БАВ с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ. Изучаются методы количественного прогнозирования биологической активности БАВ.

Формы текущего контроля и промежуточной аттестации: опрос. Форма промежуточной аттестации: зачёт.