

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 17.11.2023 14:00:04
Уникальный программный ключ: B1.O.29. Молекулярный дизайн биологически активных соединений
d56ba15a9b6e5c64a7319e2c5ae3bb2cddb840af0

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Код и наименование направления подготовки, профиля: 18.03.01 Химическая технология. Химическая технология лекарственных средств.

Квалификация (степень) выпускника: Бакалавр

Форма обучения: Очная

Формируемая(ые) компетенция(и):

ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов.

ИДОПК-1.1: Использует знания о строении вещества, природе химической связи для характеристики различных классов химических соединений и их свойств.

ИДОПК-1.2: Предлагает интерпретацию различных технологических процессов, основываясь на знании различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов.

ИДОПК-1.3: Анализирует и использует механизмы химических реакций для объяснения технологических процессов и процессов, происходящих в окружающем мире.

ИДОПК-1.4: Интерпретирует строение вещества на основании физико-химических принципов и закономерностей.

УК-1: Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.

ИДУК-1.1: Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие.

ИДУК-1.2: Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи.

ИДУК-1.3: Осуществляет поиск информации для решения, поставленной задачи по различным типам запросов.

ИДУК-1.4: При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения, в том числе с применением философского понятийного аппарата.

ИДУК-1.5: Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

Объем и место дисциплины в структуре ОПОП:

Дисциплина относится к обязательной части ОПОП, осваивается на 3 курсе, 6 семестр, в соответствии с учебным планом, общая трудоемкость дисциплины в зачетных единицах составляет 3 з. е. (108 ч.).

Содержание дисциплины:

Раздел 1. Основные направления молекулярного дизайна биологически активных соединений (БАС). Тема 1.1. Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАС. 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 БАС программой PASS online. Включает проведение виртуального скрининга программой PASS. Тема 1.3. Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАС. Включает в себя изучение типов компьютерных программ для квантово-химических расчётов и проведение квантово-химических расчётов в моделировании молекул БАС. Тема 1.4. Множественный регрессионный анализ в мо-

делировании структур БАС. Включает в себя изучение компьютерных программ для проведения множественного регрессионного анализа и использование множественного регрессионного анализа в моделировании структур БАС. 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 БАС с заданными свойствами. Правило Липински. В теме рассматривается построение структур БАС 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 AK_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга. Изучается молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2) и анализ результатов докинга. Тема 1.10. Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга. Рассматривает молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)2) и анализ результатов докинга. Раздел 2. Практические аспекты молекулярного дизайна БАС. Тема 2.1. Модели качественного поиска БАС. Способы создания, оценка и валидация. В теме изучаются модели качественного поиска БАС, 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 БАС, способы их создания, оценка и валидация. Тема 2.3. Способ поиска БАС методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг). Рассматривается способ поиска БАС методом молекулярного докинга. Тема 2.4. Количественное прогнозирование биологической активности БАС с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ. Изучаются методы количественного прогнозирования биологической активности БАС.

Форма промежуточной аттестации: зачет.