

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 17.11.2023 13:25:06  
Уникальный программный ключ: B1.O.32. Молекулярный дизайн биологически активных соединений  
d56ba45a9b6e5c64a719a7c5ae3bb2cddb840af0

## АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

**Код и наименование направления подготовки, профиля:** 19.03.01 Биотехнология. Фармацевтическая биотехнология.

**Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр.

**Форма обучения:** очная.

**Формируемая (ые) компетенция (и):**

ОПК-2 – способен осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ профессиональной информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий, включая проведение расчетов и моделирование, с учетом основных требований информационной безопасности.

ИДОПК-2.1 – осуществляет поиск, хранение, обработку и анализ профессиональной информации из различных источников и баз данных.

ИДОПК-2.2 – применяет базовые знания в области информационных, компьютерных и сетевых технологий для представления профессиональной информации в требуемом формате с учетом основных требований информационной безопасности.

ИДОПК-2.3 – осуществляет проведение расчетов и моделирование процессов для решения профессиональных задач с помощью информационных, компьютерных и сетевых технологий.

ПК-1 – способен проводить работы по фармацевтической разработке лекарственных средств.

ИДПК-1.1 – проводит исследования, испытания и экспериментальные работы по фармацевтической разработке.

ИДПК-1.2 – разрабатывает новую нормативную документацию на лекарственные средства.

ИДПК-1.3 – применяет методы статистической обработки полученных результатов исследований, испытаний и экспериментов с использованием современного программного обеспечения.

**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 часов).

**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 БАС, 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 моделировании 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 задан-

ными 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.