

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лужанин Владимир Геннадьевич
Должность: Ректор
Дата подписания: 27.08.2026 14:32:13
Уникальный программный ключ:
d56ba45a9b6e5c64a319e2c5ae3bb2cda0b040a0

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования
«Пермская государственная фармацевтическая академия»
Министерства здравоохранения Российской Федерации

Центр ИТ и цифровой трансформации
(наименование кафедры)

УТВЕРЖДЕН
решением кафедры
«___»___20___ г.,
протокол № ____

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ
Б1.О.29 Молекулярный дизайн биологически активных соединений
(наименование дисциплины)

Уровень образования _____ высшее образование _____
Программа _____ прикладного бакалавриата _____
Направление подготовки _____ 18.03.01 Химическая технология _____
Квалификация выпускника _____ Бакалавр _____

Год набора - 2026

Пермь 2025

ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины	Контролируемые компетенции	Наименование оценочного средства / назначение оценочного средства (текущий контроль (ТК)/промежуточная аттестация (ПА))
1	Основные направления молекулярного дизайна биологически активных соединений (БАС)		
1.1	Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАС. Подходы к выбору кандидатов в соединения лидеры	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5	Опрос / ТК
1.2	Оценка биологической активности программой PASS online (виртуальный скрининг)		Опрос / ТК
1.3	Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАС		Опрос / ТК
1.4	Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАС		Опрос / ТК
1.5	Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка		Опрос / ТК
1.6	Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ		Опрос / ТК
1.7	Построение структур БАС с заданными свойствами. Правило Липински		Опрос / ТК
1.8	Молекулярный докинг. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus)		Опрос / ТК
1.9	Молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга		Опрос / ТК
1.10	Молекулярный докинг программой АК_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга		Опрос / ТК
2	Практические аспекты молекулярного дизайна БАС		
2.1	Модели качественного поиска БАС. Способы создания, оценка и валидация	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4	Опрос / ТК

2.2	Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация	УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5	Опрос / ТК
2.3	Способ поиска БАС методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг)		Опрос / ТК
2.4	Количественное прогнозирование биологической активности БАС с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ		Опрос / ТК
	Промежуточная аттестация (зачет)		Тест / ПА

ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ
Оценочные средства: опрос

СПЕЦИФИКАЦИЯ ОЦЕНОЧНОГО СРЕДСТВА
ОПРОС

1. Характеристика оценочного средства.

Опрос – это средство контроля, проводимое с целью выявления уровня усвоения материала обучающимися по дисциплине.

Оценочное средство « опрос » соответствует:

- Федеральному государственному образовательному стандарту высшего образования по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология (уровень бакалавриата), утвержденного приказом министерства образования и науки Российской Федерации от 11 марта 2015 г. №193;
- основной профессиональной образовательной программе по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология (уровень бакалавриата) профилю Фармацевтическая биотехнология;
- рабочей программе дисциплины Б1.О.29. Молекулярный дизайн биологически активных соединений, реализуемой по соответствующей основной профессиональной образовательной программе.

При помощи данного оценочного средства осуществляется контроль и управление процессом приобретения обучающимися необходимых знаний, умений и владений, определенных ФГОС по соответствующему направлению подготовки в качестве результатов освоения учебных модулей либо отдельных дисциплин.

2. Система оценивания результатов.

Оценка результатов выполнения заданий оценочного средства осуществляется на основе их соотнесения с планируемыми результатами обучения по дисциплине и установленными критериями оценивания сформированности закрепленных компетенций.

Критерии и шкала оценивания результатов опроса:

- оценка «отлично» выставляется обучающемуся при полном ответе на вопрос, правильном использовании терминологии, уверенных ответах на дополнительные вопросы;
- оценка «хорошо» выставляется обучающемуся при полном ответе на вопрос, наличии ошибок в терминологии, неуверенных ответах на дополнительные вопросы;
- оценка «удовлетворительно» выставляется обучающемуся при неполном ответе на вопрос, наличии ошибок в терминологии, неуверенных ответах на дополнительные вопросы;
- оценка «неудовлетворительно» выставляется обучающемуся при отсутствии ответа.

3. Комплект оценочных средств.

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования

«Пермская государственная фармацевтическая академия»
Министерства здравоохранения Российской Федерации

Центр ИТ и цифровой трансформации

КОМПЛЕКТ ВОПРОСОВ

по дисциплине Б1.О.29. Молекулярный дизайн биологически активных соединений

Раздел 1. Основные направления молекулярного дизайна биологически активных соединений (БАС)

Тема 1.1 «Основные понятия и цели молекулярного дизайна БАС».

1. Что лежит в основе молекулярного дизайна?

Правильный ответ:

Конструирование новых химич. соединений с заданными свойствами с привлечением компьютерных, теоретич. и эксперим. методов. Опирается на имеющиеся сведения о механизме действия химич. веществ и/или эмпирич. соотношения «структура – свойство» или «структура – активность».

2. Приведите классификацию направлений молекулярного дизайна.

Правильный ответ:

Два направления молекулярного дизайна, сложившиеся в этой области:

1. Структурно-ориентированный дизайн;
2. Функционально-ориентированный дизайн.

3. Что такое структурно-ориентированный дизайн?

Правильный ответ:

К одному из видов молекулярного дизайна БАС относится структурно-ориентированный дизайн, или химический дизайн.

Предметом химического дизайна является конструирование (сборка) соединений из неких молекулярных фрагментов (блоков) типа детского конструктора. Отметим, что к понятию «химический дизайн» близко словосочетание «получение вещества (или материала) с заданными свойствами».

4. Дайте определение функционально-ориентированного дизайна?

Правильный ответ:

Функционально-ориентированный дизайн решает задачу синтеза соединений, которые должны обладать набором четко определенных, заранее заданных свойств. Здесь конечная цель состоит в оптимизации структуры целевого соединения с тем, чтобы

добиться максимальной эффективности в выполнении им требуемой функции.

Это могут быть химические свойства, как, например, каталитическая активность, подобная активности биологических катализаторов (ферментов), или просто определенная реакционная способность, отвечающая тем или иным нуждам синтеза; гидрофильность, гидрофобность (липофильность), биологическая активность, в конечном счете, направленная на лечение определенных болезней или на борьбу с насекомыми-вредителями.

5. Что такое соединение лидер?

Правильный ответ:

Соединение-лидер – это соединение, обладающее определенной физиологической активностью, на базе которого будет создаваться лекарственное вещество. Соединение-лидер не должно быть слишком полярным или липофильным, содержать токсифорные группы или группы, которые могут давать токсичные метаболиты (ADMET), необратимо реагировать с биоминералами.

6. Дайте определение понятию «молекулярный дизайн БАС».

Правильный ответ:

Молекулярное моделирование и конструирование (молекулярный дизайн) — это звенья общего процесса создания молекулярной системы от замысла до воплощения.

С большой долей условности технологию создания молекулярной системы можно отнести либо к биотехнологии, когда речь идет о биомолекулах, например о протеинах (белках), либо к химической технологии и нанотехнологии, в случае химических соединений и наноструктур.

7. Опишите принцип отбора соединений в ряды.

Правильный ответ:

Принцип отбора соединений в ряды основан на гомологическом принципе, поэтому в ряды отбирают гомологи.

8. Какие преимущества даёт дизайн БАС с использованием гомологических рядов?

Правильный ответ:

Дизайн БАС с использованием гомологических рядов позволяет получить статистически значимые модели «структура – свойство» или «структура – активность».

9. Какие вы знаете направления молекулярного дизайна?

Правильный ответ:

«Молекулярный дизайн», можно для удобства в нём выделить два направления, сложившиеся в этой области, которые мы назовем «структурно-ориентированным дизайном» и «функционально-ориентированным дизайном».

К структурно-ориентированному дизайну мы относим работы по созданию молекул с необычными структурными характеристиками, причем не обязательно в связи с

какими-то полезными свойствами получающихся новых веществ.

Функционально-ориентированный дизайн решает задачу синтеза соединений, которые должны обладать набором четко определенных, заранее заданных свойств. Здесь конечная цель состоит в оптимизации структуры целевого соединения с тем, чтобы добиться максимальной эффективности в выполнении им требуемой функции.

10. В чем состоит цель распределения соединений в гомологические ряды?

Правильный ответ:

Получение статистически значимых регрессионных моделей молекулярного дизайна.

11. С какой целью проводят исследования оценки влияния изменения заместителей в структуре молекулы?

Правильный ответ:

Исследования оценки влияния изменения заместителей в структуре молекулы проводят с целью исследования зависимости «структура – свойство» или «структура – активность».

12. В чём отличие структурно-ориентированного дизайна от функционально-ориентированного дизайна?

Правильный ответ:

Структурно-ориентированный дизайн ставит своей целью получение структур независимо от их функциональности, а функционально-ориентированный дизайн заключается в конструировании БАС с заданными свойствами.

13. Как можно использовать функционально-ориентированный дизайн в поиске соединения-лидера?

Правильный ответ:

Модификацией структур БАС с использованием регрессионных моделей «структура – свойство» или «структура – активность».

14. Объясните цели молекулярного дизайна.

Правильный ответ:

Цель молекулярного дизайна - найти молекулы с желаемыми функциональными возможностями. Обширные просторы химического пространства открывают бесконечные возможности для обнаружения новых молекул в самых разных областях применения. Но в то же время сама бесконечность - это то, что приносит трудности, когда кто-то намеревается найти наиболее многообещающего кандидата за приемлемое количество времени.

15. В чём заключается основной смысл использования соединений-лидеров в поиске БАС?

Правильный ответ:

Соединения- лидеры позволяют определить ключевые точки моделей «структура – свойство» или «структура – активность» и провести адекватную проверку найденных моделей.

Тема 1.2 «Оценка биологической активности программой PASS online (виртуальный скрининг)».

1. Дайте определение понятию «виртуальный скрининг»?

Правильный ответ:

Виртуальный скрининг — это вычислительная процедура, которая включает автоматизированный просмотр базы данных химических соединений и отбор тех из них, для которых прогнозируется наличие желаемых свойств. Чаще всего виртуальный скрининг применяется при разработке новых лекарственных препаратов для поиска химических соединений, обладающих нужным видом биологической активности.

2. Что представляет собой терапевтическая мишень в онлайн сервисе PASS online ?

Правильный ответ:

Терапевтическая мишень в онлайн сервисе PASS online представляет собой ферменты, которые лежат в основе изучаемой биологической активности.

3. С использованием, каких компьютерных программ и онлайн ресурсов проводят прогноз спектра биологической активности БАС?

Правильный ответ:

Прогнозирование определенного вида биологической активности или широкого набора биологических активностей (профилей) осуществляют с помощью таких веб-сервисов, как ChemSpider, SuperPred, CPI-DRAR, SEA, PASS Online.

4. Как определить вероятность проявления биологической активности? В чём её смысл?

Правильный ответ:

Результат прогноза спектра биологической активности представлен в PASS в виде упорядоченного списка названий соответствующих активностей и вероятностей P_a – «быть активным», смысл вероятности в процентном значении проявления биологической активности БАС.

5. В чем заключается виртуальный скрининг?

Правильный ответ:

Виртуальный скрининг основан на процедуре прогнозирования целевого свойства (как правило, величины или вероятности проявления определенного вида биологической активности) при помощи количественных моделей «структура-свойство» (обычно с учётом их областей применимости) для всех соединений базы данных химических структур.

6. Что представляет собой спектр биологической активности БАС?

Правильный ответ:

Спектр биологической активности БАС представляет собой перечень прогнозируемых биологических активностей конкретного БАС в виде названий.

7. К терапевтическим мишеням в программе PASS online относятся?

Правильный ответ:

К терапевтическим мишеням в программе PASS online относятся ферменты, болезни, органы и структуры организма.

8. Что представляет собой формат pdb?

Правильный ответ:

Банк данных белков (PDB) - это база данных для трехмерных структурных данных больших биологических молекул, таких как белки и нуклеиновые кислоты. Данные, обычно получаемые с помощью рентгеновской кристаллографии, ЯМР-спектроскопии или, все чаще, криоэлектронной микроскопии и представляемые биологами и биохимики со всего мира, свободно доступны в Интернете через веб-сайты входящих в него организаций (PDBe, PDBj, RCSB и BMRB).

9. Как происходит прогнозирование биологической активности программой PASS?

Правильный ответ:

Подход, применяемый в PASS для прогнозирования биологической активности того или иного химического соединения, базируется на предположении, что Активность = Структура, а структура соединения, в свою очередь, описывается ее отдельными функциональными элементами (дескрипторами) – радикалами, функциональными группами атомов и основан на Байесовской вероятности (Байесовская вероятность — это интерпретация понятия вероятности, используемая в байесовской теории. Вероятность определяется как степень уверенности в истинности суждения).

10. Способ оценки вероятности проявления биологической активности.

Правильный ответ:

Вероятность определяется как степень уверенности в истинности суждения в виде значений P_a и P_i .

11. Можно ли спрогнозировать количественно биологическую активность программой PASS?

Правильный ответ:

Нет, спрогнозировать количественно биологическую активность программой PASS нельзя.

12. Как можно использовать прогноз программой PASS в поиске соединения-лидера?

Правильный ответ:

Да, прогноз программой PASS можно использовать в поиске соединения-лидера по значениям P_a и P_i .

13. Какие преимущества имеет дизайн БАС с использованием PASS?

Правильный ответ:

Позволяет проводить отбор структур с наиболее вероятной биологической активностью.

14. С использованием, какого параметра проводится оценка вероятности проявления биологической активности?

Правильный ответ:

Оценка вероятности проявления биологической активности в программе PASS проводится с использованием величины « P_a » - вероятности наличия биологической активности.

15. В чем заключается принцип проведения виртуального скрининга программой PASS?

Правильный ответ:

Принцип проведения виртуального скрининга программой PASS заключается в прогнозировании спектра биологической активности уже известных на сегодняшний день химических соединений.

Тема 1.3 «Квантово-химические расчёты в моделировании молекул БАС».

1. Назовите методы квантово-химического расчёта структур.

Правильный ответ:

Методы квантово-химического расчёта структур:
полуэмпирические методы AM1 и PM3 и методы молекулярной механики

2. В чём заключается цель квантово-химического моделирования в анализе БАС?

Правильный ответ:

Цель квантово-химического моделирования в анализе БАС заключается в расчёте структурных дескрипторов БАС.

3. Что такое термодинамическая функция?

Правильный ответ:

Это некая функция, зависящая от нескольких независимых параметров, которые однозначно определяют состояние термодинамической системы. Значение

термодинамической функции состояния зависит только от состояния термодинамической системы и не зависит от того, как система пришла в это состояние. Частным случаем функций состояний являются термодинамические потенциалы.

4. Какие программы используют при проведении квантово-химических расчётов?

Правильный ответ:

Программы используют при проведении квантово-химических расчётов: GAMESS, Firefly/PC GAMESS, Gaussian.

5. Какие методы квантово-химических расчётов вы знаете?

Правильный ответ:

Полуэмпирические (AM1 и PM3) и неэмпирические (Хартри Фока, функционала плотности).

6. Чем отличаются методы молекулярной механики от полуэмпирических?

Правильный ответ:

Методы молекулярной механики (ММ) используют законы классической физики для предсказания структуры и свойств молекул. Существует множество методов ММ, каждый из которых характеризуется определенным силовым полем (force field).

Квантовомеханические методы, напротив, используют законы квантовой механики, а не классической физики в качестве основы для вычислений, т. е. в ходе расчетов решается уравнение Шредингера. Однако, как известно, точное решение этого уравнения возможно лишь для самых малых систем, поэтому в любом квантово-механическом методе используется определенный набор ограничений и упрощений.

7. Какие программы можно использовать для проведения квантово-химических расчётов?

Правильный ответ:

Программы используют при проведении квантово-химических расчётов: GAMESS, Firefly/PC GAMESS, Gaussian.

8. Для чего нужно проводить оптимизацию молекул перед проведением квантово-химических расчётов?

Правильный ответ:

Оптимизация - это улучшение ее свойств, чтобы увеличить вероятность успеха при экспериментальной проверке. Рассматривая молекулу-кандидат (лиганд) мы можем выделить в ней важные для взаимодействия с белком-мишенью части, структурную основу — скелет — и другие группы, предположительно не участвующие в интересующем нас взаимодействии или даже мешающие контакту лиганда с мишенью.

9. Какие факторы влияют на скорость квантово-химических расчётов структур БАС?

Правильный ответ:

На скорость квантово-химических расчётов структур БАС влияет способ расчёта, размер молекулы и архитектура компьютера.

10. Какие полуэмпирические методы расчёта вы знаете?

Правильный ответ:

AM1 (Austin Model 1 Hamiltonian). В 1985г. Дьюар с сотрудниками усовершенствовал метод MNDO. Он предназначен для расчета параметров органических молекул, содержащих элементы длинных рядов периодической таблицы за исключением переходных металлов. Дает хорошие результаты для соединений в которых есть одновременно азот и кислород.

PM3 (Parametric Method Number 3). Является параметризацией метода AM1. Полуэмпирический метод самосогласованного поля, предназначенный для расчета свойств органических молекул, содержащих элементы длинных рядов периодической таблицы. Кроме того, данный метод позволяет учитывать образование внутри- и межмолекулярных связей. Дополнительные параметры для переходных металлов введены в методе PM3(tm).

11. С какой целью проводится оптимизация геометрии молекулы?

Правильный ответ:

Оптимизация геометрии молекулы - это улучшение ее свойств, чтобы увеличить вероятность успеха при экспериментальной проверке.

12. Как называются заряды, рассчитанные с использованием квантово-химических расчётов?

Правильный ответ:

Частичный заряд (qч) – разность между эффективным и формальным зарядом иона или атома.

13. В каких средах можно проводить квантово- химические расчёты?

Правильный ответ:

Квантово- химические расчёты можно проводить в газовой фазе, а так же в растворителях: вода, этанол и другие.

14. Как способ используется для построения структуры программы Gaussian?

Правильный ответ:

Для построения структуры программы Gaussian используется Z-матрица.

15. Какие преимущества имеют полуэмпирические методы расчёты перед неэмпирическими?

Правильный ответ:

Преимущества полуэмпирических методов расчёты перед неэмпирическими: скорость расчётов и близость к экспериментальным.

Тема 1.4 «Множественный регрессионный анализ в моделировании структур БАС».

1. Дайте определение регрессионного анализа.

Правильный ответ:

Регрессионный анализ - это статистический метод исследования взаимосвязи переменных.

2. В чем отличие множественного регрессионного анализа от простого?

Правильный ответ:

Множественный регрессионный анализ занимается исследованием зависимости одной переменной Y от нескольких объясняющих или независимых переменных X_1, X_2, X_n в условиях конкретного места и конкретного времени.

3. Что такое коэффициент корреляции (R)?

Правильный ответ:

Коэффициент корреляции - это статистический показатель зависимости двух случайных величин.

4. Дайте определение критерию Фишера (F) и для чего он нужен?

Правильный ответ:

Критерий Фишера (F -критерий, критерий наименьшей значимой разности) — апостериорный статистический критерий, используемый для сравнения дисперсий двух вариационных рядов, то есть для определения значимых различий между групповыми средними в установке дисперсионного анализа.

5. В чем смысл среднеквадратичной ошибки (S)?

Правильный ответ:

Среднеквадратическая ошибка (S) или Среднеквадратическое отклонение (среднее квадратическое отклонение, среднеквадратичное отклонение, квадратичное отклонение, стандартное отклонение, стандартный разброс) — в теории вероятностей и статистике наиболее распространённый показатель рассеивания значений случайной величины относительно её математического ожидания.

6. Что такое множественный линейный регрессионный анализ?

Правильный ответ:

Множественная линейная регрессия (МЛР), также известная как множественная регрессия, — это статистический метод, который использует несколько объясняющих переменных для прогнозирования результата переменной ответа.

7. В чем отличие простых регрессионных уравнений от множественной?

Правильный ответ:

Простые регрессионные уравнения описывают зависимость признака от одной величины, а множественные модели от нескольких.

8. Какие параметры позволяют оценить качество полученных регрессионных моделей?

Правильный ответ:

Оценку значимости проводят с использованием статистических критериев:

Критерий Фишера (F);

Коэффициент регрессии (R)

Среднеквадратическая ошибка (S)

9. Применение уравнений множественной регрессии на практике?

Правильный ответ:

Построение количественных моделей «структура – свойство» или «структура – активность».

10. Какие задачи позволяет решить корреляционный анализ?

Правильный ответ:

Корреляция используется для представления линейных отношений между двумя переменными.

11. По каким параметрам проводят оценку регрессионных уравнений?

Правильный ответ:

Оценку значимости проводят с использованием статистических критериев:

Критерий Фишера (F);

Коэффициент регрессии (R)

Среднеквадратическая ошибка (S)

12. Какими методами проводят оценку уравнений регрессии?

Правильный ответ:

Оценку уравнений регрессии проводят на независимой выборке или с использованием статистических критериев.

13. С помощью каких программ можно провести корреляционный анализ?

Правильный ответ:

Корреляционный анализ можно провести с использованием программы Microsoft Excel и Statistica.

14. В чём состоит роль свободного члена в уравнении линейной регрессии, полученном программой Excel?

Правильный ответ:

Показывает отклонение полученной регрессионной или корреляционной модели от нуля.

15. Чем отличается множественный регрессионный анализ от простого?

Правильный ответ:

Простые регрессионные уравнения описывают зависимость признака от одной величины, а множественные модели от нескольких.

Тема 1.5 «Количественные соотношения «структура-свойство». Методы построения моделей и оценка».

1. Что означает зависимость «структура-свойство»?

Правильный ответ:

Зависимость «структура-свойство» означает зависимость изучаемого свойства от структуры.

2. Какие дескрипторы можно использовать для описания структуры?

Правильный ответ:

Дескрипторы для описания структуры: квантово-химические, скоринговые, физико-химические и пространственные.

3. Способы расчёта структурных дескрипторов.

Правильный ответ:

Квантово-химические, регрессионные или оптимизационные.

4. Какие программы можно использовать для построения моделей?

Правильный ответ:

Для построения моделей можно использовать программы Microsoft Excel и Statistica.

5. Типы регрессионных зависимостей в исследованиях «структура-свойство».

Правильный ответ:

Простая и множественная регрессионные зависимости используются в исследованиях «структура-свойство».

6. Что понимают под исследованиями «структура-свойство»?

Правильный ответ:

Под исследованиями «структура-свойство» понимают зависимость анализируемого свойства от структуры.

7. Какие дескрипторы можно отнести к структурным?

Правильный ответ:

К структурным относятся дескрипторы: квантово-химические и пространственные.

8. Как проводят оценку моделей «структура-свойство»?

Правильный ответ:

Оценку уравнений регрессии проводят на независимой выборке или с использованием статистических критериев.

9. В чём заключается валидация моделей «структура-свойство»?

Правильный ответ:

Термин валидация заключается в оценке составленных моделей «структура-свойство» на независимой выборке или с использованием статистических критериев.

10. Какие свойства можно прогнозировать с использованием моделей «структура-свойство»?

Правильный ответ:

С использованием моделей «структура-свойство» можно прогнозировать различные свойства БАС, как например, физико-химические.

11. С помощью, каких программ можно провести регрессионный анализ?

Правильный ответ:

Регрессионный анализ можно провести с использованием программы Microsoft Excel и Staistica.

12. Можно ли с использованием модели «структура-свойство» провести прогноз констант липофильности?

Правильный ответ:

Да, провести можно, главное нужно использовать статистически значимую модель «структура-свойство» и рассчитанные структурные дескрипторы.

13. Как используются квантово-химические расчёты в моделировании «структура-свойство»?

Правильный ответ:

Квантово-химические расчёты в моделировании «структура-свойство» используются для расчёта структурных дескрипторов, которые в дальнейшем будут использованы при моделировании.

14. Какие программы используются для проведения квантово-химических расчётов?

Правильный ответ:

Программы используют при проведении квантово-химических расчётов: GAMESS, Firefly/PC GAMESS, Gaussian.

15. Методы, используемые для построения моделей «структура-свойство»?

Правильный ответ:

Методы, используемые для построения моделей «структура-свойство»: корреляционный и регрессионный.

Тема 1.6 «Теоретический расчёт констант липофильности и ионизации с использованием компьютерных моделей и программ».

1. К физико-химическим дескрипторам относятся ?

Правильный ответ:

К физико-химическим дескрипторам относятся константы липофильности и ионизации.

2. От чего зависит константа липофильности ?

Правильный ответ:

Константа липофильности зависит от распределения анализируемого БАС между гидрофобной и водной фазами.

3. Влияние структурных фрагментов на константу липофильности ?

Правильный ответ:

Влияние структурных фрагментов на константу липофильности заключается в увеличении или уменьшении её значений в зависимости от структуры.

4. Могут ли оказывать влияние константы липофильности и ионизации на биологическую активность БАС?

Правильный ответ:

Да могут оказывать влияние путём свойств адсорбции и распределения.

5. Какие программы можно использовать для прогнозирования констант липофильности?

Правильный ответ:

Для прогнозирования констант липофильности можно использовать программы: ChemDraw, ACD, MarvinSketch.

6. С помощью какой программы можно провести моделирование констант ионизации ?

Правильный ответ:

Моделирование констант ионизации можно провести с использованием программ: Microsoft Excel и Staistica.

7. Как влияет структура на значение константы липофильности?

Правильный ответ:

Влияние структурных фрагментов на константу липофильности заключается в увеличении или уменьшении её значений в зависимости от структуры.

8. Какие функциональные группы (ФГ) в структуре БАС влияют на ионизацию?

Правильный ответ:

Функциональные группы (ФГ) в структуре БАС, которые влияют на ионизацию: карбоксильная группа, аминогруппа.

9. Дайте определение константа липофильности это?

Правильный ответ:

Константа липофильности – это мера распределения анализируемого БАС между гидрофобной и водной фазами.

10. Каким образом оказывают влияние на биологическую активность константы липофильности?

Правильный ответ:

Константы липофильности оказывают влияние на биологическую активность путём свойств адсорбции и распределения.

11. Какие константы определяют потенциометрическим методом?

Правильный ответ:

Потенциометрическим методом определяют константы ионизации.

12. У каких соединений больше значения констант кислотности (pK_a)?

Правильный ответ:

Больше значения констант кислотности (pK_a) у соединений содержащих кислотные функциональные группы.

13. Влияние структурных фрагментов на константу ионизации ?

Правильный ответ:

На константу ионизации оказывает влияние наличие в структуре БАС ионизируемых функциональных групп.

14. В чём преимущество компьютерного прогнозирования констант ионизации?

Правильный ответ:

Преимущество компьютерного прогнозирования констант ионизации заключается в экономичности и скорости.

15. Какие программы можно использовать для прогнозирования констант ионизации?

Правильный ответ:

Для прогнозирования констант ионизации можно использовать программы: ChemDraw, ACD, MarvinSketch.

Тема 1.7 «Построение структур БАС с заданными свойствами. Правило Липински».

1. К структурным дескрипторам относятся ?

Правильный ответ:

К структурным относятся дескрипторы: квантово-химические и пространственные.

2. От чего зависит константа ионизации ?

Правильный ответ:

Константа ионизации зависит от наличия в структуре БАС ионизируемых функциональных групп.

3. Влияние структурных фрагментов на константу липофильности ?

Правильный ответ:

Влияние структурных фрагментов на константу липофильности заключается в увеличении или уменьшении её значений в зависимости от структуры.

4. Могут ли оказывать влияние константы липофильности и ионизации на биологическую активность БАС?

Правильный ответ:

Константы липофильности оказывают влияние на биологическую активность путём свойств адсорбции и распределения. Константы ионизации оказывают влияние путём ионизации.

5. Какие программы можно использовать для прогнозирования констант липофильности?

Правильный ответ:

Для прогнозирования констант липофильности можно использовать программы: ChemDraw, ACD, MarvinSketch.

6. Значение константы липофильности в соответствии с правилом Липински при котором БАС будет проявлять оральную активность?

Правильный ответ:

Значение константы липофильности в соответствии с правилом Липински при котором БАС будет проявлять оральную активность – коэффициент распределения октанол-вода ($\log P$), не должен превышать 5.

7. Требования к молекуле БАС проявляющей биологическую активность?

Правильный ответ:

Требования к молекуле БАС проявляющей биологическую активность:

Не более 5 донорных водородных связей (общее количество азот-водородных и кислород-водородных связей);

Не более 10 акцепторных водородных связей (общее количество атомов азота или кислорода);

Молекулярная масса соединения менее 500 а.е.м.;

Коэффициент распределения октанол-вода ($\log P$), не должен превышать 5.

8. В каком случае БАС будет иметь низкую биодоступность в организме?

Правильный ответ:

БАС будет иметь низкую биодоступность в организме при $\log P > 5$, Молекулярная масса соединения более 500 а.е.м.;

9. Влияние фармакофоров в структуре БАС на их биодоступность?

Правильный ответ:

Для конструирования новых соединений, обладающих биологической активностью, используется фармакофорный подход, основанный на структурах известных препаратов. Наличие фармакофоров в структуре БАС повышает их биодоступность.

10. Влияние структурных факторов на константу липофильности?

Правильный ответ:

Влияние структурных фрагментов на константу липофильности заключается в увеличении или уменьшении её значений в зависимости от структуры.

11. С какой целью используется правило Липински в дизайне БАС?

Правильный ответ:

Правило Липински в дизайне БАС используется для облегчения отбора перспективных БАС основываясь на их физико-химических свойствах и структурных особенностях.

12. Какие дескрипторы используются в правиле Липински?

Правильный ответ:

Константа липофильности, молекулярная масса, число доноров и акцепторов водородной связи.

13. В случае, когда молекулярная масса равна 600 и константа липофильности 6, будет ли соединение соответствовать правилу Липински?

Правильный ответ:

В этом случае соединение не соответствует правилу Липински.

14. Какие функциональные группы (ФГ) в структуре БАС влияют на липофильность?

Правильный ответ:

Функциональные группы (ФГ) в структуре БАС влияют на липофильность: карбоксильная, гидроксильная, аминогруппа.

15. С помощью, какой программы можно проверить соответствие соединения правилу Липински?

Правильный ответ:

Для проверки соответствия соединения правилу Липински можно использовать программы: ChemDraw, ACD, MarvinSketch.

Тема 1.8 «Молекулярный докинг. Докинг «родного» лиганда по ЦОГ1 и 2 и гидролаза E.Coli(S.Aureus)».

1. Что такое молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг (или молекулярная стыковка) — это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования

устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой.

2. Виды молекулярного докинга?

Правильный ответ:

На основании учёта подвижность можно выделить:

– Фиксированный докинг. Вид докинга, не учитывающий подвижность молекул, участвующих во взаимодействии. Фиксированный докинг, как правило, не применяется для расчёта лиганд-белкового взаимодействия и в основном используется для расчёта белок-белковых соединений.

– Гибкий докинг. В свою очередь, данный вид докинга может подразделяться на несколько подвидов в зависимости от учёта подвижности. Как правило, в расчёт берётся либо только подвижность лиганда, либо дополнительно подвижность некоторых цепочек биомолекулы. Полная подвижность биомолекулы во внимание принимается редко в свете высоких вычислительных затрат.

3. В чём отличие докинга «родного лиганда» от других видов докинга?

Правильный ответ:

Докинг родного лиганда заключается в проведении молекулярного докинга с использованием лиганда использованного при построении комплекса: белок – лиганд в базе данных белковых структур.

4. С какой целью в молекулярном докинге используют фермент?

Правильный ответ:

В молекулярном докинге используют фермент в качестве биомолекулы или субстрата.

5. Возможности и ограничения молекулярного докинга?

Правильный ответ:

К ограничениям молекулярного докинга относится использование молекул органических БАС.

6. Дайте определение понятия «участок связывания»?

Правильный ответ:

Участок связывания в активном центре фермента обеспечивает формирование комплекса фермента с субстратом. Каталитический участок обеспечивает химическое превращение субстрата. Каждый фермент имеет один или несколько активных центров, с которыми связывается субстрат.

7. Что такое скоринговые функции?

Правильный ответ:

В области вычислительной химии и молекулярного моделирования оценочные функции - это математические функции, используемые для приблизительного прогнозирования сродства связывания между двумя молекулами после их стыковки. Чаще всего одна из молекул представляет собой небольшое органическое соединение, такое как лекарственное средство, а вторая - биологическую мишень лекарственного средства, такую как белковый рецептор. Функции оценки также были разработаны для прогнозирования силы межмолекулярных взаимодействий между двумя белками или между белком и ДНК.

8. Что позволяют оценить скоринговые функции?

Правильный ответ:

Скоринговые функции позволяют оценить взаимодействие лиганда с белком-мишенью, посредством использования скоринговых функций.

9. Как определить селективность БАС по отношению к ферменту?

Правильный ответ:

Определить селективность БАС по отношению к ферменту можно с использованием энергий взаимодействия и константы ингибирования.

10. Дайте определение энергии связывания?

Правильный ответ:

Энергия связывания представляет собой разницу между энергией комплекса и суммой энергий каждой молекулы в отдельности.

11. Какие программы можно использовать для молекулярного докинга?

Правильный ответ:

В настоящее время существует множество программ молекулярного докинга (наиболее известные из них — Dock, Autodock, GOLD, Flexx, Glide), отличающиеся оценочными функциями, методами минимизации и дополнительными возможностями.

12. Дайте определение, что такое константа ингибирования?

Правильный ответ:

Константа ингибирования- это концентрации ингибитора, при которой достигается 50% ингибирования фермента (представлена в форме IC50).

13. Что характеризует межмолекулярная энергия при взаимодействии лиганда с рецептором?

Правильный ответ:

Межмолекулярная энергия – это энергия между несвязанными атомами или между атомами в разных молекулах.

14. Какой формат используется для построения структур при проведении молекулярного докинга?

Правильный ответ:

Для построения структур при проведении молекулярного докинга используется формат .pdb. Файл с расширением pdb в основном представляет собой файл, содержащий данные, относящиеся к структуре трехмерной биологической молекулы. Данные включают координаты атомов, структуры атомов, связность атомов, структуру белков, структуру нуклеиновых кислот и многое другое.

15. В чём отличие энергии связывания от межмолекулярной энергии?

Правильный ответ:

Отличие энергии связывания от межмолекулярной энергии заключается в том, что энергия связывания отражает связывание с ферментом исследуемого лиганда, а межмолекулярная энергия характеризует межмолекулярные взаимодействия.

Тема 1.9 «Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг ЦОГ1 и 2). Анализ результатов докинга».

1. Что такое молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг (или молекулярная стыковка) — это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой.

2. Виды молекулярного докинга?

Правильный ответ:

На основании учета подвижности можно выделить:

– Фиксированный докинг. Вид докинга, не учитывающий подвижность молекул, участвующих во взаимодействии. Фиксированный докинг, как правило, не применяется для расчёта лиганд-белкового взаимодействия и в основном используется для расчёта белок-белковых соединений.

– Гибкий докинг. В свою очередь, данный вид докинга может подразделяться на несколько подвидов в зависимости от учёта подвижности. Как правило, в расчёт берётся либо только подвижность лиганда, либо дополнительно подвижность некоторых цепочек биомолекулы. Полная подвижность биомолекулы во внимание принимается редко в свете высоких вычислительных затрат.

3. С какой целью в молекулярном докинге используют фермент?

Правильный ответ:

В молекулярном докинге используют фермент в качестве биомиметики или субстрата.

4. Для чего используется молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг используется для исследования и оценки взаимодействия исследуемого БАС с ферментом.

5. Что такое терапевтическая мишень?

Правильный ответ:

Терапевтическая мишень в применении к молекулярному докингу подразумевает собой мишень, которая лежит в основе исследуемой биологической активности.

6. Возможности и ограничения молекулярного докинга?

Правильный ответ:

К ограничениям молекулярного докинга относится использование молекул органических БАС.

7. Дайте определение понятия межмолекулярное взаимодействие.

Правильный ответ:

Межмолекулярное взаимодействие - это взаимодействие между молекулами и/или атомами, не приводящее к образованию ковалентных (химических) связей.

8. Что такое скоринговые функции?

Правильный ответ:

В области вычислительной химии и молекулярного моделирования оценочные функции - это математические функции, используемые для приблизительного прогнозирования сродства связывания между двумя молекулами после их стыковки. Чаще всего одна из молекул представляет собой небольшое органическое соединение, такое как лекарственное средство, а вторая - биологическую мишень лекарственного средства, такую как белковый рецептор. Функции оценки также были разработаны для прогнозирования силы межмолекулярных взаимодействий между двумя белками или между белком и ДНК.

9. Что позволяют оценить скоринговые функции?

Правильный ответ:

Скоринговые функции позволяют оценить взаимодействие лиганда с белком-мишенью, посредством использования скоринговых функций.

10. Как определить селективность БАС по отношению к ферменту?

Правильный ответ:

Определить селективность БАС по отношению к ферменту можно с использованием энергий взаимодействия и константы ингибирования.

11. Что характеризует межмолекулярная энергия при взаимодействии лиганда с рецептором?

Правильный ответ:

Межмолекулярная энергия характеризует энергию между несвязанными атомами или между атомами в разных молекулах.

12. Дайте определение энергии связывания?

Правильный ответ:

Энергия связывания представляет собой разницу между энергией комплекса и суммой энергий каждой молекулы в отдельности.

13. Возможности и ограничения молекулярного докинга?

Правильный ответ:

К ограничениям молекулярного докинга относится использование молекул органических БАС.

14. Какие программы можно использовать для молекулярного докинга?

Правильный ответ:

В настоящее время существует множество программ молекулярного докинга (наиболее известные из них — Dock, Autodock, GOLD, Flexx, Glide), отличающиеся оценочными функциями, методами минимизации и дополнительными возможностями.

15. В каком формате проводят конструирование соединений для проведения молекулярного докинга?

Правильный ответ:

Для построения структур при проведении молекулярного докинга используется формат .pdb. Файл с расширением pdb в основном представляет собой файл, содержащий данные, относящиеся к структуре трехмерной биологической молекулы. Данные включают координаты атомов, структуры атомов, связность атомов, структуру белков, структуру нуклеиновых кислот и многое другое.

Тема 1.10 «Молекулярный докинг программой AK_QSAR (Молекулярный докинг гидролаза E.Coli(S.Aureus)). Анализ результатов докинга».

1. Для чего используется молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг используется для исследования и оценки взаимодействия исследуемого БАС с ферментом.

2. Что такое терапевтическая мишень?

Правильный ответ:

Терапевтическая мишень в применении к молекулярному докингу подразумевает собой мишень, которая лежит в основе исследуемой биологической активности.

3. Возможности и ограничения молекулярного докинга?

Правильный ответ:

К ограничениям молекулярного докинга относится использование молекул органических БАС. К возможностям относится использование в виртуальном скрининге БАС на биологическую активность основанном на механизме действия БАС.

4. Дайте определение понятия межмолекулярное взаимодействие.

Правильный ответ:

Межмолекулярное взаимодействие - это взаимодействие между молекулами и/или атомами, не приводящее к образованию ковалентных (химических) связей.

5. Что такое скоринговые функции?

Правильный ответ:

В области вычислительной химии и молекулярного моделирования оценочные функции - это математические функции, используемые для приблизительного прогнозирования сродства связывания между двумя молекулами после их стыковки. Чаще всего одна из молекул представляет собой небольшое органическое соединение, такое как лекарственное средство, а вторая - биологическую мишень лекарственного средства, такую как белковый рецептор. Функции оценки также были разработаны для прогнозирования силы межмолекулярных взаимодействий между двумя белками или между белком и ДНК.

6. Что позволяют оценить скоринговые функции?

Правильный ответ:

Скоринговые функции позволяют оценить взаимодействие лиганда с белком-мишенью, посредством использования скоринговых функций.

7. Как определить селективность БАС по отношению к ферменту?

Правильный ответ:

Определить селективность БАС по отношению к ферменту можно с использованием энергий взаимодействия и константы ингибирования.

8. Что такое молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг (или молекулярная стыковка) — это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой.

9. Виды молекулярного докинга?

Правильный ответ:

На основании учёта подвижность можно выделить:

- Фиксированный докинг. Вид докинга, не учитывающий подвижность молекул, участвующих во взаимодействии. Фиксированный докинг, как правило, не применяется для расчёта лиганд-белкового взаимодействия и в основном используется для расчёта белок-белковых соединений.
- Гибкий докинг. В свою очередь, данный вид докинга может подразделяться на несколько подвидов в зависимости от учёта подвижности. Как правило, в расчёт берётся либо только подвижность лиганда, либо дополнительно подвижность некоторых цепочек биомолекулы. Полная подвижность биомолекулы во внимание принимается редко в свете высоких вычислительных затрат.

10. В чём отличие докинга «родного лиганда» от других видов докинга?

Правильный ответ:

Докинг родного лиганда заключается в проведении молекулярного докинга с использованием лиганда использованного при построении комплекса: белок – лиганд в базе данных белковых структур.

11. С какой целью в молекулярном докинге используют фермент?

Правильный ответ:

В молекулярном докинге используют фермент в качестве биомолекулы или субстрата.

12. Дайте определение понятия «участок связывания»?

Правильный ответ:

Участок связывания в активном центре фермента обеспечивает формирование комплекса фермента с субстратом. Каталитический участок обеспечивает химическое превращение субстрата. Каждый фермент имеет один или несколько активных центров, с которыми связывается субстрат.

14. Что характеризует межмолекулярная энергия при взаимодействии лиганда с рецептором?

Правильный ответ:

Межмолекулярная энергия характеризует энергию между несвязанными атомами или между атомами в разных молекулах.

15. Какой формат используется для построения структур при проведении молекулярного докинга?

Правильный ответ:

Для построения структур при проведении молекулярного докинга используется формат .pdb. Файл с расширением pdb в основном представляет собой файл, содержащий данные, относящиеся к структуре трехмерной биологической молекулы. Данные включают координаты атомов, структуры атомов, связность атомов, структуру белков, структуру нуклеиновых кислот и многое другое.

16. В чём отличие энергии связывания от межмолекулярной энергии?

Правильный ответ:

Отличие энергии связывания от межмолекулярной энергии заключается в том, что энергия связывания отражает связывание с ферментом исследуемого лиганда, а межмолекулярная энергия характеризует межмолекулярные взаимодействия.

Раздел 2. Практические аспекты молекулярного дизайна БАС.

Тема 2.1 «Модели качественного поиска БАС. Способы создания, оценка и валидация».

1. Что такое качественный поиск?

Правильный ответ:

Качественный поиск – это поиск и отбор соединений по признаку «активно» или «неактивно» без количественной составляющей прогноза.

2. В чем отличие качественного поиска от количественного?

Правильный ответ:

Основное отличие качественного поиска от количественного заключается в невозможности провести расчёт величины биологической активности, а только сделать вывод : «активно» или «неактивно».

3. Для чего используется молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг используется для исследования и оценки взаимодействия исследуемого БАС с ферментом.

4. Что такое терапевтическая мишень?

Правильный ответ:

Терапевтическая мишень в применении к молекулярному докингу подразумевает собой мишень, которая лежит в основе исследуемой биологической активности.

5. Возможности и ограничения качественного поиска?

Правильный ответ:

Качественный поиск позволяет провести виртуальный скрининг основанный на отклике «активно» или «неактивно», не позволяющей оценить выраженность биологической активности.

6. Дайте определение понятия межмолекулярное взаимодействие.

Правильный ответ:

Межмолекулярное взаимодействие - это взаимодействие между молекулами и/или атомами, не приводящее к образованию ковалентных (химических) связей.

7. Что такое качественный поиск БАС с определенным видом биологической активности?

Правильный ответ:

Качественный поиск БАС с определенным видом биологической активности даёт ответ на вопрос о наличии или отсутствии биологической активности на которую проводят виртуальный скрининг.

8. Что позволяют оценить скоринговые функции?

Правильный ответ:

Скоринговые функции позволяют оценить взаимодействие лиганда с белком-мишенью, посредством использования скоринговых функций.

9. Как провести валидацию модели качественного поиска БАС с определенным видом биологической активности?

Правильный ответ:

Валидация модели качественного поиска БАС с определенным видом биологической активности заключается в проведении проверки (валидации) модели качественного поиска БАС на независимой выборке экспериментальных данных.

10. Что такое скоринговые функции?

Правильный ответ:

В области вычислительной химии и молекулярного моделирования оценочные функции - это математические функции, используемые для приблизительного прогнозирования сродства связывания между двумя молекулами после их стыковки. Чаще всего одна из молекул представляет собой небольшое органическое соединение, такое как лекарственное средство, а вторая - биологическую мишень лекарственного средства,

такую как белковый рецептор. Функции оценки также были разработаны для прогнозирования силы межмолекулярных взаимодействий между двумя белками или между белком и ДНК.

11. Что позволяют оценить скоринговые функции?

Правильный ответ:

Скоринговые функции позволяют оценить взаимодействие лиганда с белком-мишенью, посредством использования скоринговых функций.

12. Как определить селективность БАС по отношению к ферменту?

Правильный ответ:

Определить селективность БАС по отношению к ферменту можно с использованием энергий взаимодействия и константы ингибирования.

13. Что такое молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг (или молекулярная стыковка) — это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой.

14. Виды молекулярного докинга?

Правильный ответ:

На основании учёта подвижности можно выделить:

- Фиксированный докинг. Вид докинга, не учитывающий подвижность молекул, участвующих во взаимодействии. Фиксированный докинг, как правило, не применяется для расчёта лиганд-белкового взаимодействия и в основном используется для расчёта белок-белковых соединений.
- Гибкий докинг. В свою очередь, данный вид докинга может подразделяться на несколько подвидов в зависимости от учёта подвижности. Как правило, в расчёт берётся либо только подвижность лиганда, либо дополнительно подвижность некоторых цепочек биомишени. Полная подвижность биомишени во внимание принимается редко в свете высоких вычислительных затрат.

15. Какие программы можно использовать для молекулярного докинга?

Правильный ответ:

В настоящее время существует множество программ молекулярного докинга (наиболее известные из них — Dock, Autodock, GOLD, Flexx, Glide), отличающиеся оценочными функциями, методами минимизации и дополнительными возможностями.

Тема 2.2 «Поиск количественных соотношений структура-активность. Методы построения моделей, оценка и валидация».

1. Что означает зависимость «структура-активность»?

Правильный ответ:

Зависимость «структура-активность» - означает направление исследований в области молекулярного дизайна заключается в исследовании связи структуры в виде структурных дескрипторов с биологической активностью.

2. Какие дескрипторы можно использовать для описания структуры?

Правильный ответ:

Дескрипторы для описания структуры: квантово-химические, скоринговые, физико-химические и пространственные.

3. Способы расчёта структурных дескрипторов.

Правильный ответ:

Квантово-химические, регрессионные или оптимизационные.

4. Какие программы можно использовать для построения моделей?

Правильный ответ:

Для построения моделей можно использовать программы Microsoft Excel и Statistica.

5. Типы регрессионных зависимостей в исследованиях «структура-активность».

Правильный ответ:

В регрессионных исследованиях «структура-активность» используются два типа зависимостей: линейная (простая и множественная) и нелинейная.

6. Что понимают под исследованиями «структура-активность»?

Правильный ответ:

Под исследованиями «структура-активность» подразумевают изучение зависимости биологической активности от строения БАС.

7. Какие дескрипторы можно отнести к структурным?

Правильный ответ:

К структурным относятся дескрипторы: квантово-химические и пространственные.

8. Как проводят оценку моделей «структура-активность»?

Правильный ответ:

Оценку моделей «структура-активность» проводят в основном двумя способами: первый способ заключается в использовании статистических критериев (коэффициент корреляции, критерий Фишера), второй способ основан на использовании независимой выборки экспериментальных данных.

9. В чём заключается валидация моделей «структура-активность»?

Правильный ответ:

Валидация моделей «структура-активность» заключается в их проверке на качество прогнозируемой активности.

10. Могут ли оказывать влияние константы липофильности и ионизации на биологическую активность БАС?

Правильный ответ:

Да могут оказывать влияние путём свойств адсорбции и распределения.

11. Какие программы можно использовать для прогнозирования констант липофильности?

Правильный ответ:

Для прогнозирования констант липофильности можно использовать программы: ChemDraw, ACD, MarvinSketch.

12. Значение константы липофильности в соответствии с правилом Липински при котором БАС будет проявлять оральную активность?

Правильный ответ:

Значение константы липофильности в соответствии с правилом Липински при котором БАС будет проявлять оральную активность – коэффициент распределения октанол-вода ($\log P$), не должен превышать 5.

13. Требования к молекуле БАС проявляющей биологическую активность?

Правильный ответ:

Требования к молекуле БАС проявляющей биологическую активность:

Не более 5 донорных водородных связей (общее количество азот-водородных и кислород-водородных связей);

Не более 10 акцепторных водородных связей (общее количество атомов азота или кислорода);

Молекулярная масса соединения менее 500 а.е.м.;

Коэффициент распределения октанол-вода ($\log P$), не должен превышать 5.

14. В каком случае БАС будет иметь низкую биодоступность в организме?

Правильный ответ:

БАС будет иметь низкую биодоступность в организме при $\log P > 5$, Молекулярная масса соединения более 500 а.е.м.;

15. Влияние фармакофоров в структуре БАС на их биодоступность?

Правильный ответ:

Для конструирования новых соединений, обладающих биологической активностью, используется фармакофорный подход, основанный на структурах известных препаратов. Наличие фармакофоров в структуре БАС повышает их биодоступность.

Тема 2.3 «Способ поиска БАС методом молекулярного докинга (виртуальный скрининг)».

1. Что такое биологическая активность?

Правильный ответ:

Биологическая активность - это особая способность или свойство препарата оказывать определенный биологический эффект.

2. Дайте определение виртуального скрининга.

Правильный ответ:

Виртуальный скрининг — это вычислительная процедура, которая включает автоматизированный просмотр базы данных химических соединений и отбор тех из них, для которых прогнозируется наличие желаемых свойств. Чаще всего виртуальный скрининг применяется при разработке новых лекарственных препаратов для поиска химических соединений, обладающих нужным видом биологической активности.

2. Какая основная цель использования виртуального скрининга?

Правильный ответ:

Основная цель использования виртуального скрининга – это автоматизированный просмотр базы данных химических соединений и отбор тех из них, для которых прогнозируется наличие желаемых свойств.

3. Для чего используется молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг используется для исследования и оценки взаимодействия исследуемого БАС с ферментом.

4. С какой целью в молекулярном докинге используют фермент?

Правильный ответ:

В молекулярном докинге используют фермент в качестве биомиметики или субстрата.

5. Возможности и ограничения виртуального скрининга?

Правильный ответ:

Основной возможностью виртуального скрининга является высокопроизводительный поиск новых БАС с определенной биологической активностью, ограничением которого является размер и параметры базы данных.

6. Дайте определение понятия межмолекулярное взаимодействие.

Правильный ответ:

Межмолекулярное взаимодействие - это взаимодействие между молекулами и/или атомами, не приводящее к образованию ковалентных (химических) связей.

7. Что такое поиск БАС с определенным видом биологической активности?

Правильный ответ:

Поиск БАС с определенным видом биологической активности – это виртуальный скрининг с использованием специализированных алгоритмов, настроенных на прогнозирование биологической активности основанный на закономерностях «структура - активность».

8. Что позволяют оценить скоринговые функции?

Правильный ответ:

Скоринговые функции позволяют оценить взаимодействие лиганда с белком-мишенью, посредством использования скоринговых функций.

9. Как провести валидацию модели поиска БАС с определенным видом биологической активности?

Правильный ответ:

Валидацию модели поиска БАС с определенным видом биологической активности проводят по статистическим критериям или на независимой вы

11. Что такое молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг (или молекулярная стыковка) — это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой.

12. Виды молекулярного докинга?

Правильный ответ:

На основании учёта подвижность можно выделить:

- Фиксированный докинг. Вид докинга, не учитывающий подвижность молекул, участвующих во взаимодействии. Фиксированный докинг, как правило, не применяется для расчёта лиганд-белкового взаимодействия и в основном используется для расчёта белок-белковых соединений.
- Гибкий докинг. В свою очередь, данный вид докинга может подразделяться на несколько подвидов в зависимости от учёта подвижности. Как правило, в расчёт берётся либо только подвижность лиганда, либо дополнительно подвижность некоторых цепочек биомолекулы. Полная подвижность биомолекулы во внимание принимается редко в свете высоких вычислительных затрат.

13. В чём отличие докинга «родного лиганда» от других видов докинга?

Правильный ответ:

Докинг родного лиганда заключается в проведении молекулярного докинга с использованием лиганда использованного при построении комплекса: белок – лиганд в базе данных белковых структур.

14. С какой целью в молекулярном докинге используют фермент?

Правильный ответ:

В молекулярном докинге используют фермент в качестве биомолекулы или субстрата.

15. Дайте определение понятия «участок связывания»?

Правильный ответ:

Участок связывания в активном центре фермента обеспечивает формирование комплекса фермента с субстратом. Каталитический участок обеспечивает химическое превращение субстрата. Каждый фермент имеет один или несколько активных центров, с которыми связывается субстрат.

Тема 2.4 «Количественное прогнозирование биологической активности БАС с использованием уравнений множественной регрессии и компьютерных программ».

1. Что такое биологическая активность?

Правильный ответ:

Биологическая активность - это особая способность или свойство препарата оказывать определенный биологический эффект.

2. Дайте определение количественного прогноза биологической активности.

Правильный ответ:

Количественный прогноз биологической активности – это прогнозирование числовой характеристики степени выраженности биологической активности.

3. Какая основная цель использования виртуального скрининга?

Правильный ответ:

Основная цель использования виртуального скрининга – это автоматизированный просмотр базы данных химических соединений и отбор тех из них, для которых прогнозируется наличие желаемых свойств.

4. Для чего используется молекулярный докинг?

Правильный ответ:

Молекулярный докинг используется для исследования и оценки взаимодействия исследуемого БАС с ферментом.

5. С какой целью в молекулярном докинге используют фермент?

Правильный ответ:

В молекулярном докинге используют фермент в качестве биомишени или субстрата.

6. Возможности и ограничения количественного прогнозирования биологической активности?

Правильный ответ:

Количественное прогнозирование биологической активности ограничивается гомологичными рядами БАС, потому что при использовании негомологичных рядов точность прогнозирования снижается.

7. Дайте определение понятия межмолекулярное взаимодействие.

Правильный ответ:

Межмолекулярное взаимодействие - это взаимодействие между молекулами и/или атомами, не приводящее к образованию ковалентных (химических) связей.

8. Что такое поиск БАС с определенным видом биологической активности?

Правильный ответ:

Поиск БАС с определенным видом биологической активности – это виртуальный скрининг с использованием специализированных алгоритмов, настроенных на прогнозирование биологической активности основанный на закономерностях «структура - активность».

9. Что позволяют оценить скоринговые функции?

Правильный ответ:

Скоринговые функции позволяют оценить взаимодействие лиганда с белком-мишенью, посредством использования скоринговых функций.

10. Как провести валидацию модели количественного прогнозирования биологической активности?

Правильный ответ:

Валидацию модели количественного прогнозирования биологической активности проводят по статистическим критериям или на независимой вы

11. Способы расчёта структурных дескрипторов.

Правильный ответ:

Квантово-химические, регрессионные или оптимизационные.

12. Какие программы можно использовать для построения моделей?

Правильный ответ:

Для построения моделей можно использовать программы Microsoft Excel и Statistica.

13. Типы регрессионных зависимостей в исследованиях «структура-активность».

Правильный ответ:

В регрессионных исследованиях «структура-активность» используются два типа зависимостей: линейная (простая и множественная) и нелинейная.

14. Что понимают под исследованиями «структура-активность»?

Правильный ответ:

Под исследованиями «структура-активность» подразумевают изучение зависимости биологической активности от строения БАС.

15. Какие дескрипторы можно отнести к структурным?

Правильный ответ:

К структурным относятся дескрипторы: квантово-химические и пространственные.

Составители:

д-р. фармацевт. наук, профессор кафедры фармацевтической химии Андрюков К.В.

ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ

Форма промежуточной аттестации: зачет.

Оценочные средства: тест.

СПЕЦИФИКАЦИЯ ОЦЕНОЧНОГО СРЕДСТВА

1. Характеристика оценочного средства.

Тест – система стандартизированных заданий, позволяющая автоматизировать процедуру измерения уровня знаний и умений обучающегося.

Оценочное средство «тест» соответствует:

- Федеральному государственному образовательному стандарту высшего образования по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология (уровень бакалавриата), утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 11 марта 2015 г. №193;

- основной профессиональной образовательной программе по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология (уровень бакалавриата), профилю Фармацевтическая биотехнология;

- рабочей программе дисциплины Б1.О.29. Молекулярный дизайн биологически активных соединений, реализуемой по соответствующей основной профессиональной образовательной программе.

При помощи данного оценочного средства осуществляется контроль и управление процессом приобретения обучающимися необходимых знаний, умений и владений, определенных ФГОС по соответствующему направлению подготовки в качестве результатов освоения учебной дисциплины.

2. Система оценивания результатов

Оценка результатов выполнения заданий оценочного средства осуществляется на основе их соотнесения с планируемыми результатами обучения по дисциплине и установленными критериями оценивания сформированности закрепленных компетенций. Зачёт проводится в письменной форме. Время, отводимое обучающемуся на выполнение теста - 60 минут.

Критерии и шкала оценивания:

недифференцированная оценка:

60 и более % правильных ответов – оценка «зачтено»,

Менее 60 % правильных ответов – оценка «не зачтено».

3. Комплект тестовых заданий для зачёта

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования

«Пермская государственная фармацевтическая академия»
Министерства здравоохранения Российской Федерации

Центр ИТ и цифровой трансформации

УТВЕРЖДЕН
решением кафедры
«___»___20___ г.,
протокол № ___

КОМПЛЕКТ ТЕСТОВЫХ ЗАДАНИЙ ДЛЯ ЗАЧЁТА

по дисциплине Б1.О.29. Молекулярный дизайн биологически активных соединений

18.03.01 ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Квалификация выпускника Бакалавр

Форма обучения Очная

Год набора – 2026

Пермь, 2025

Составители:

д-р. фармацевт. наук, профессор кафедры фармацевтической химии Андрюков К.В.

ОПК-1. Способность изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, 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.

№ п/п	Задание	Правильный ответ	Компетенция, индикатор
1.	Молекулярный дизайн БАС это: а. Молекулярный докинг веществ с ферментом б. Прогнозирование констант липофильности с. Конструирование новых химических соединений с заданными свойствами д. Исследование биологической активности	с. Конструирование новых химических соединений с заданными свойствами	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
2.	Цель молекулярного дизайна БАС: а. Построение структуры с заданными свойствами б. Поиск ингибиторов ДНК с. Корреляционный анализ д. Квантово-химические расчёты	а. Построение структуры с заданными свойствами	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
3.	Структурно-ориентированный дизайн заключается в: а. Проведении квантово-	д. Создании множества разнообразных	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4

	химических расчётов b. Молекулярном докинге c. Исследовании биологической активности d. Создании множества разнообразных новых и экзотических молекулярных структур	новых и экзотических молекулярных структур	УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
4.	Стратегия молекулярного дизайна предполагает: a. Измерение констант ионизации b. Глубокое понимание поставленной задачи, изучение молекулярных механизмов целевой функции вещества c. Изучение гидрофобных фрагментов d. Регрессионный анализ	b. Глубокое понимание поставленной задачи, изучение молекулярных механизмов целевой функции вещества	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
5.	К терапевтическим мишеням при дизайне БАС с противовоспалительной активностью относятся: a. Ферменты циклооксигеназа 1 и 2 b. Анальгетическая активность c. Коагуляция молекулы белка d. Ионизированная карбоксильная группа	a. Ферменты циклооксигеназа 1 и 2	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
6.	Прогноз спектра биологической активности в онлайн сервисе PASS online используется для: a. Квантово- химических расчётов b. Биологических испытаний БАС c. Построения структур соединений d. Поиска БАС	d. Поиска БАС	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
7.	Виртуальный скрининг это: a. Испытание биологической активности b. Теоретический метод	b. Теоретический метод отбора перспективных БАС с использованием	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1,

	отбора перспективных БАС с использованием компьютерных программ с. Построение гомологических рядов БАС d. Способ построения структур БАС	компьютерных программ	ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
8.	Какой из приведенных методов квантово-химического расчёта структур БАС относится к полуэмпирическим: a. Метод Хартри-Фока (HF) b. Метод функционала плотности (DFT) с. Метод Parametrison 3 (PM3) d. Метод молекулярной механики	с. Метод Parametrison 3 (PM3)	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
9.	Квантово-химические расчёты проводят с использованием программы: a. Gaussian 03 b. Microsoft Word c. Microsoft Excel d. WordPad	a. Gaussian 03	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
10.	Какой из приведенных методов расчёта относится к квантово-химическим: a. Полуэмпирический метод b. Метод молекулярного докинга c. Структурный метод d. Фрагментарный метод	a. Полуэмпирический метод	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
11.	Цель квантово-химического моделирования структуры в анализе БАС: a. Построение структуры БАС b. Поиск гомологов БАС с. Расчёт квантово-химических дескрипторов d. Исследование липофильности	с. Расчёт квантово-химических дескрипторов	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5

12.	С какой целью проводят оптимизацию структуры БАС при проведении квантово-химических расчётов: а. Для изучения заместителей б. С целью получения оптимального пространственного строения молекулы БАС в квантово-химических расчётах с. С целью виртуального скрининга д. Для проведения синтеза и биологических испытаний	б. С целью получения оптимального пространственного строения молекулы БАС в квантово-химических расчётах	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
13.	Факторы компьютерного оборудования, оказывающие влияние на скорость квантово-химических расчётов: а. Используемый метод ввода б. Способ задания структуры БАС с. Частота процессора и объём оперативной памяти д. Количество изомеров вводимой структуры	с. Частота процессора и объём оперативной памяти	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
14.	К видам регрессионного анализа относится: а. Статистический анализ б. Множественный линейный регрессионный анализ с. Химический анализ д. Фрагментарный анализ	б. Множественный линейный регрессионный анализ	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
15.	Для чего служит критерий Фишера (F) при создании регрессионных моделей: а. Оценки степени связи между двумя или несколькими независимыми переменными б. Оценки качества	б. Оценки качества регрессионной модели в целом и по параметрам	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5

	регрессионной модели в целом и по параметрам с. Показывает тип уравнения множественной регрессии d. Для построения регрессионной модели		
16.	Что позволяет оценить средняя квадратичная ошибка (S): a. Качество выборки в модели b. Степень ошибки полученного результата измерения к его истинному значению с. Разброс остатков наблюдаемых d. Степень связи между двумя или несколькими независимыми переменными	b. Степень ошибки полученного результата измерения к его истинному значению	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
17.	К физико-химическим дескрипторам относятся: a. Суммарный заряд на атомах C, O, N b. Константы липофильности (logP) и ионизации (pKa и pKв) с. Реакционная способность d. Молекулярная масса	b. Константы липофильности (logP) и ионизации (pKa и pKв)	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
18.	Моделирование «структура-свойство» можно использовать для: a. Прогнозирования физико-химических свойств БАС (logP, pKa, pKв) b. Пеоретического расчёта биологической активности БАС с. Проведения виртуального скрининга БАС d. Расчёта суммарной молекулярной массы на атомах	a. Прогнозирования физико-химических свойств БАС (logP, pKa, pKв)	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
19.	Комбинаторный анализ методом перебора заключается в: a. Исследовании биологической активности БАС b. Поиске БАС путём перебора серий аналогичных соединений с различными заместителями с. Квантово- химических	b. Поиске БАС путём перебора серий аналогичных соединений с различными заместителями	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5

	расчётах БАС d. Конформационном поиске БАС		
20.	В чём заключается отличие докинга «родного» лиганда от других видов докинга: a. Использует лиганд обладающий специфической активностью к ферменту b. Использует «родной» лиганд в составе комплекса с молекулой фермента взятый из базы данных RCSB Protein Data Bank c. Применяется лиганд обладающий всеми видами биологической активности БАС d. В прогнозировании физико-химических свойств	b. Использует «родной» лиганд в составе комплекса с молекулой фермента взятый из базы данных RCSB Protein Data Bank	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
21.	Для чего используются скоринговые (рассчитанные) оценочные функции в молекулярном докинге лиганда с ферментом: a. Используются для расчёта и оценки силы связывания лиганда с ферментом в молекулярном докинге b. Обеспечивает субстратную специфичность, и каталитический участок, который осуществляет химическое превращение субстрата c. Для связывания и каталитического превращения субстрата фермента d. Для прогнозирования физико-химических свойств	a. Используются для расчёта и оценки силы связывания лиганда с ферментом в молекулярном докинге	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
22.	Зависимость «структура-свойство» БАС показывает: a. Количество изомеров структуры БАС b. Зависимость структуры БАС от выбранного свойства c. Точности составленных регрессионных моделей d. Зависимость биологической активности от структуры	b. Зависимость структуры БАС от выбранного свойства	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5

23.	С какой целью фермент используют в методе молекулярного докинга лиганда: а. Для прогнозирования физико-химических свойств б. Для поиска в базе данных RCSB Protein Data Bank с. При проведении квантово-химических расчётов д. В качестве мишени при докинге лиганда	д. В качестве мишени при докинге лиганда	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
24.	Какой дескриптор относится к скоринговым функциям в молекулярном докинге: а. Константы ионизации (рКа и рКв) б. Константа липофильности (logP) с. Скоринговая функция характеризующая энергию связывания с ферментом (Ве) д. Суммарный заряд молекулы	с. Скоринговая функция характеризующая энергию связывания с ферментом (Ве)	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
25.	С использованием каких критериев проводят проверку (валидацию) моделей «структура-свойство» и «структура-активность»: а. С использованием теоретически рассчитанных свойств б. С использованием молекулярной массы с. По коэффициенту корреляции (R), критерию Фишера (F) и величине средней квадратичной ошибки (S) д. С использованием квантово-химических дескрипторов	с. По коэффициенту корреляции (R), критерию Фишера (F) и величине средней квадратичной ошибки (S)	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
26.	С какой целью проводят синтез в молекулярном дизайне БАС: а. Исследование биологической активности б. Расчёт физико-химических дескрипторов с. Синтез и исследование биологической активности БАС	с. Синтез и исследование биологической активности БАС	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5

	d. Изучение поляризуемости		
27.	Гомологический ряд в молекулярном дизайне БАС это: а. Соединения алкильной и гетероциклической природы б. Ряд соединений с различными видами биологической активности с. Ряд химических соединений одинакового (гомологичного) типа д. Химические соединения, синтезированные в разных условиях	с. Ряд химических соединений одинакового (гомологичного) типа	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
28.	Какую специфичность обеспечивает «участок связывания» фермента: а. Используется для расчёта физико-химических свойств б. Обеспечивает субстратную специфичность связывание фермента с лигандом с. Это место на его поверхности, где происходит связывание и каталитическое превращение субстрата фермента д. Участок фермента, обладающий гидрофобными свойствами	б. Обеспечивает субстратную специфичность связывание фермента с лигандом	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
29.	В чем заключается основная особенность множественного регрессионного анализа: а. В изучении только биологической активности б. В выполнении анализа с использованием компьютерных программ с. В способе исследования констант ионизации д. Содержит 2 и более (множество) независимых переменных	д. Содержит 2 и более (множество) независимых переменных	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
30.	К фармакофорному моделированию БАС относится а. Использование молекулярной массы б. Проведение квантово-химические расчёты с. Использование общей структуры фармакофора БАС	с. Использование общей структуры фармакофора БАС	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5

	d. прогнозирование онлайн сервисом PASS		
31.	Вид статистического метода анализа, основанный на изучении регрессионной зависимости одной или нескольких независимых переменных – это анализ _____.	Регрессионный	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
32.	Разновидность регрессионного анализа, основанная на установлении зависимости одной переменной от двух или более независимых переменных – это анализ _____.	Множественный регрессионный	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
33.	Зависимость (корреляция) двух переменных друг от друга показывает коэффициент _____.	Корреляции	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
34.	Структурные характеристики, основанные на методах квантовой химии дескрипторы _____.	Квантово - химические	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
35.	Метод расчёта структурных дескрипторов БАС с использованием квантово-химических программ с использованием метода PM3 относится к _____.	Полуэмпирическим	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
36.	Как называется метод анализа, который заключается в отборе значимых дескрипторов - _____.	Корреляционный	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
37.	Метод молекулярного моделирования БАС, который позволяет предсказать наиболее	Докинг	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4

	выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой – это молекулярный _____.		УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
38.	Место на поверхности фермента или активный участок, где происходит связывание и каталитическое превращение субстрата – это центр _____.	Активный	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
39.	Дизайн БАС с определенным видом биологической активности лежит в основе определения - _____.	Молекулярный дизайн	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
40.	Называние одного из основных направлений молекулярного дизайна БАС в зависимости от структуры – _____.	Структурно-ориентированный	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
41.	Метод компьютерного отбора (просеивания) перспективных БАС – это _____.	Виртуальный скрининг	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
42.	Онлайн сервис с помощью которого можно оценить вероятность проявления биологической активности БАС – _____.	PASS online	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
43.	Какую программу можно использовать для построения регрессионных моделей «структура-свойство» и «структура-активность» – _____.	Microsoft Excel	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5

44.	Область использования модели «структура-активность» БАС — _____.	Виртуальный скрининг	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
45.	Программа, которую можно использовать для проведения молекулярного докинга — _____.	AutoDock 4	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
46.	Какой метод структурного моделирования целевого соединения применяется, чтобы добиться максимальной эффективности в выполнении им требуемой функции — _____.	Оптимизация	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
47.	Конструирование химическим синтезом органической молекулы — это _____.	Синтез	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
48.	Константа липофильности (logP) позволяет исследовать - _____.	Липофильность	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
49.	Требование к молекуле БАС проявляющей биологическую активность по правилу «пяти Липински» по молекулярной массе, должно быть не более (напишите число словом) — _____.	Пятьсот	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5

50.	Какое свойство химическое характеризуют константы ионизации (кислотности (рКа) и основности (рКв)) БАС характеризуют – _____.	Ионизация	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
51.	В качестве какого компонента лиганд-белкового комплекса используют фермент в методе молекулярного докинга лиганда: – _____.	Мишень	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
52.	Воспроизведение биогенных веществ, модификация молекул соединений с известной биологической активностью – _____.	Направленный синтез	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
53.	Отбор новых продуктов химического или биологического синтеза, перспективных для применения в качестве лекарственных средств – _____.	Фармакологический скрининг	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
54.	Какой тип корреляции, когда две переменные перемещаются в одном и том же направлении, то есть увеличение одной переменной приведет к соответствующему увеличению другой переменной и наоборот, такая корреляция называется – _____.	Положительная	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
55.	Какой тип корреляции, когда две переменные движутся в разных направлениях таким образом, что увеличение одной переменной приведет к уменьшению другой переменной, и наоборот, такая корреляция называется – _____.	Отрицательная	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
56.	Направление химии, рассматривающее строение и свойства химических соединений, реакционную способность,	Квантовая	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1,

	кинетику и механизм химических реакций на основе квантовой механики – _____.		ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
57.	Взаимное пространственное расположение ее атомов, которое определяется длинами связей и валентными углами – это _____.	Геометрия молекулы	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
58.	Набор пространственных и электронных признаков, необходимых для обеспечения оптимальных супрамолекулярных взаимодействий с определённой биологической мишенью, которые могут вызывать (или блокировать) её биологический ответ – это _____.	Фармакофор	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
59.	Какая модель позволяет объяснить, за счёт чего структурно разнородные лиганды взаимодействуют с одними и теми же сайтами рецепторов – это _____.	Модель фармакофора	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5
60.	Фармакофорные центры и их взаимное расположение в пространстве, необходимые для проявления данного типа биологической активности – это _____.	Фармакофорные признаки	ОПК-1, ИДОПК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4 УК-1, ИДУК-1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5