

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**
Дизайн биоактивных веществ

Код модуля
1161174(1)

Модуль
Современные аспекты теории получения
биоактивных веществ

Екатеринбург

Оценочные материалы составлены автором(ами):

№ п/п	Фамилия, имя, отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Безматерных Максим Алексеевич	кандидат химических наук, доцент	Доцент	технологии органического синтеза
2	Обыденнов Константин Львович	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	технологии органического синтеза

Согласовано:

Управление образовательных программ

С.А. Иванченко

Авторы:

- **Обыденнов Константин Львович, Доцент, технологии органического синтеза**

1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ Дизайн биоактивных веществ

1.	Объем дисциплины в зачетных единицах	3	
2.	Виды аудиторных занятий	Лекции Практические/семинарские занятия	
3.	Промежуточная аттестация	Экзамен	
4.	Текущая аттестация	Контрольная работа	2
		Домашняя работа	2

2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ Дизайн биоактивных веществ

Индикатор – это признак / сигнал/ маркер, который показывает, на каком уровне обучающийся должен освоить результаты обучения и их предъявление должно подтвердить факт освоения предметного содержания данной дисциплины, указанного в табл. 1.3 РПМ-РПД.

Таблица 1

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)	Контрольно-оценочные средства для оценивания достижения результата обучения по дисциплине
1	2	3
ОПК-3 -Способен планировать и проводить комплексные исследования и изыскания для решения инженерных задач относящихся к профессиональной деятельности, включая проведение измерений, планирование и постановку экспериментов, интерпретацию полученных результатов	Д-1 - Проявлять умение видеть детали, упорство, аналитические умения З-1 - Сформулировать основные принципы организации и планирования научного исследования З-2 - Характеризовать возможности исследовательской аппаратуры и методов исследования, используя технические характеристики и области применения З-3 - Сделать обзор основных методов статистической обработки и анализа результатов измерений П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания	Домашняя работа № 1 Домашняя работа № 2 Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия Экзамен

	<p>экспериментальные комплексные научно-технические исследования и изыскания для решения инженерных задач в области профессиональной деятельности, включая обработку, интерпретацию и оформление результатов</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания</p>	
<p>ОПК-6 -Способен планировать и организовать работы по эксплуатации технологического оборудования и обеспечению технологических процессов в сфере своей профессиональной деятельности с учетом энерго- и ресурсоэффективност и производственного цикла и продукта</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать ответственное отношение к работе, организаторские способности</p> <p>З-1 - Перечислить основные технические параметры и технологические характеристики эксплуатируемого оборудования и реализуемых технологических процессов</p> <p>З-2 - Назвать имеющиеся ограничения режимов эксплуатации оборудования и регламенты технологических процессов</p> <p>З-3 - Объяснить принципы энерго и ресурсосбережения производственного цикла и продукта</p> <p>П-1 - Организовать в соответствии с разработанным утвержденным планом выполнение работ по эксплуатации технологического оборудования и обеспечению технологических процессов в сфере своей профессиональной деятельности</p> <p>П-2 - Предлагать и аргументированно доказывать целесообразность корректировок параметров эксплуатации оборудования и реализации технологических процессов для повышения уровня энерго и</p>	<p>Домашняя работа № 1 Домашняя работа № 2 Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия Экзамен</p>

	<p>ресурсосбережения производственного цикла и продукта</p> <p>У-1 - Технически грамотно формулировать задания по эксплуатации технологического оборудования и обеспечению технологических процессов с учетом имеющихся ограничений режимов эксплуатации оборудования и регламенты технологических процессов</p> <p>У-2 - Оценивать ход эксплуатации технологического оборудования и реализации технологических процессов на основании визуального анализа и показаний контрольно- измерительной аппаратуры</p> <p>У-3 - Обоснованно корректировать ход эксплуатации технологического оборудования и реализации технологических процессов, добиваясь повышения уровня энерго и ресурсосбережения производственного цикла и продукта</p>	
<p>ПК-1 -Способен проводить анализ научной и технической информации в области химической технологии и биотехнологии, а также смежных дисциплин с целью научной, патентной и маркетинговой поддержки проводимых фундаментальных исследований и технологических разработок</p>	<p>З-4 - Привести стратегии создания новых биоактивных препаратов</p> <p>П-5 - Структурировать научный поиск при синтезе новых органических соединений</p> <p>У-6 - Распознавать структурные фрагменты в молекулах органических соединений, определяющие их фармакологическое действие</p>	<p>Домашняя работа № 1 Домашняя работа № 2 Контрольная работа № 1 Контрольная работа № 2 Лекции Практические/семинарские занятия Экзамен</p>

3. ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ И ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ В РАМКАХ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО

**ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ В БАЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЕ
(ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ КАРТА БРС)**

3.1. Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.7		
Текущая аттестация на лекциях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>контрольная работа</i>	2,7	50
<i>контрольная работа</i>	2,9	50
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.4		
Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.6		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.3		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>домашняя работа</i>	2,12	50
<i>домашняя работа</i>	2,17	50
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– 1		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям–нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– не предусмотрено		
3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -не предусмотрено		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено		
4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено		
Текущая аттестация на онлайн-занятиях	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено		

Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено

3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

Текущая аттестация выполнения курсовой работы/проекта	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент текущей аттестации выполнения курсовой работы/проекта– не предусмотрено		
Весовой коэффициент промежуточной аттестации выполнения курсовой работы/проекта– защиты – не предусмотрено		

4. КРИТЕРИИ И УРОВНИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

4.1. В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре/институте критерии (признаки) оценивания достижений студентов по дисциплине модуля (табл. 4) в рамках контрольно-оценочных мероприятий на соответствие указанным в табл.1 результатам обучения (индикаторам).

Таблица 4

Критерии оценивания учебных достижений обучающихся

Результаты обучения	Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам
Знания	Студент демонстрирует знания и понимание в области изучения на уровне указанных индикаторов и необходимые для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Умения	Студент может применять свои знания и понимание в контекстах, представленных в оценочных заданиях, демонстрирует освоение умений на уровне указанных индикаторов и необходимых для продолжения обучения и/или выполнения трудовых функций и действий, связанных с профессиональной деятельностью.
Опыт /владение	Студент демонстрирует опыт в области изучения на уровне указанных индикаторов.
Другие результаты	Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов. Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения. Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.

4.2 Для оценивания уровня выполнения критериев (уровня достижений обучающихся при проведении контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля) используется универсальная шкала (табл. 5).

Таблица 5

Шкала оценивания достижения результатов обучения (индикаторов) по уровням

Характеристика уровней достижения результатов обучения (индикаторов)				
№ п/п	Содержание уровня выполнения критерия оценивания результатов обучения (выполненное оценочное задание)	Шкала оценивания		
		Традиционная характеристика уровня		Качественная характеристика уровня
1.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты в полном объеме, замечаний нет	Отлично (80-100 баллов)	Зачтено	Высокий (В)
2.	Результаты обучения (индикаторы) в целом достигнуты, имеются замечания, которые не требуют обязательного устранения	Хорошо (60-79 баллов)		Средний (С)
3.	Результаты обучения (индикаторы) достигнуты не в полной мере, есть замечания	Удовлетворительно (40-59 баллов)		Пороговый (П)
4.	Освоение результатов обучения не соответствует индикаторам, имеются существенные ошибки и замечания, требуется доработка	Неудовлетворительно (менее 40 баллов)	Не зачтено	Недостаточный (Н)
5.	Результат обучения не достигнут, задание не выполнено	Недостаточно свидетельств для оценивания		Нет результата

5. СОДЕРЖАНИЕ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ

5.1. Описание аудиторных контрольно-оценочных мероприятий по дисциплине модуля

5.1.1. Лекции

Самостоятельное изучение теоретического материала по темам/разделам лекций в соответствии с содержанием дисциплины (п. 1.2. РПД)

5.1.2. Практические/семинарские занятия

Примерный перечень тем

1. Компьютерное представление химической информации
2. Дескрипторы
3. Анализ данных для лиганд-ориентированного дизайна БАВ: моделирование «структура-свойство»
4. Методы и сервисы биоинформатики
5. Моделирование трехмерной структуры белков
6. Молекулярный докинг
7. Компьютерное представление химической информации. Инструменты Obabel и KNIME для конвертации между различными представлениями

8. Компьютерное представление химической информации высокомолекулярных соединений. Инструменты BLAST и SWISS-MODEL для построения моделей по гомологии.

9. Молекулярный докинг малых молекул в отношении белка-мишени.

Примерные задания

Скачайте базу данных ChEMBLdb и найдите в ней и сохраните в .sdf формате соединение с заданным индивидуальным номером. Визуализируйте соединение. Удовлетворяет ли оно правилам Липински? Добавьте в sdf файл с соединением следующие свойства: количество атомов-доноров водородной связи, количество атомов-акцепторов водородной связи, молекулярную массу, коэффициент распределения октанол-вода (logP). Добавьте свойство "author", значение которого соответствует вашему имени и фамилии, свойство "RULE 5", которое равно "yes", если вещество удовлетворяет правилам Липински и "no", если не удовлетворяет.

Осуществите кросс-докинг для бета-тубулинов 4O2A, 4O2B. Вычислите значения RMSD для лучших поз. Выберите наилучшую холо форму на основании полученных результатов. Повторите задание для гибкого докинга.

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2. Описание внеаудиторных контрольно-оценочных мероприятий и средств текущего контроля по дисциплине модуля

Разноуровневое (дифференцированное) обучение.

Базовый

5.2.1. Контрольная работа № 1

Примерный перечень тем

1. Мишень-ориентированная разработка БАВ

Примерные задания

Перечислите методы и известные инструменты для мишень-ориентированной разработки БАВ.

Чем отличаются такие принципы разработки БАВ, как введение биоизостерных групп и принципы введения фармакофорных фрагментов

Назовите способы для компьютерного представления двухмерных и трехмерных структур органических соединений.

Описать классификацию, строение, функции белков.

Рассмотреть регуляцию биохимических процессов при белок-лигандных взаимодействиях. Привести примеры.

Охарактеризовать типы оценочных функций в молекулярном докинге.

Рассмотреть типы алгоритмов поиска в молекулярном докинге

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.2. Контрольная работа № 2

Примерный перечень тем

1. Лиганд-ориентированная разработка БАВ

Примерные задания

Перечислите методы и известные инструменты для лиганд-ориентированной разработки БАВ.

Приведите примеры трехмерных дескрипторов. Какими преимуществами и недостатками обладают данный вид дескрипторов?

В чем заключается подход количественной оценки структура-свойство (QSAR). Объясните на примере подхода К. Ганча и Т. Фужиты.

Объясните, как метод частичных наименьших квадратов применяется при построении регрессионных моделей зависимости биологической активности вещества от его структуры?

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.3. Домашняя работа № 1

Примерный перечень тем

1. Молекулярный дизайн БАВ

Примерные задания

Представить обоснованные ответы на предложенные вопросы. Привести примеры конкретных БАВ:

1. Что лежит в основе молекулярного дизайна?
2. Приведите классификацию направлений молекулярного дизайна.
3. Что такое структурно-ориентированный дизайн?
4. Дайте определение функционально-ориентированного дизайна?
5. Что такое соединение лидер?
6. Дайте определение понятию «молекулярный дизайн БАВ».
7. Опишите принцип отбора соединений в ряды.
8. Какими преимуществами обладают дизайн БАВ с использованием гомологических рядов?
9. Какие вы знаете направления молекулярного дизайна?
10. В чем состоит цель распределения соединений в гомологические ряды?
11. С какой целью проводят исследования оценки влияния изменения заместителей в структуре молекулы?
12. В чём отличие структурно-ориентированного дизайна от функционально-ориентированного дизайна?
13. Как можно использовать функционально-ориентированный дизайн в поиске соединения лидера?
14. Объясните цели молекулярного дизайна.
15. В чём заключается основной смысл использования соединений-лидеров в поиске БАВ

LMS-платформа – не предусмотрена

5.2.4. Домашняя работа № 2

Примерный перечень тем

1. Мишень-ориентированная разработка БАВ.

2. Лиганд-ориентированная разработка БАВ.

3. Компьютерное представление химической информации.

4. Выравнивание аминокислотных последовательностей.

5. Оценка белок-лигандных взаимодействий.

6. Алгоритмы докинга.

Примерные задания

1. Построение пайплайна в ПО KNIME для конвертации SMILES в представление InChi и mol. Получение трехмерных структур соединений.

2. Генерация трехмерных структур из SMILES в ПО DataWarrior.

3. Генерация трехмерных структур из SMILES в ПО OBabel.

1. Осуществление выравнивания последовательностей в программе BLAST.

2. Осуществление гомологичного моделирования.

3. Оценка качества построенной модели.

1. Осуществление докинга с помощью программы AutoDock заданного набора структур.

2. Осуществление докинга с помощью программы AutoDock Vina заданного набора структур.

3. Осуществление докинга с помощью программы ArgusLab заданного набора структур.

4. Сравнение результатов докинга, полученных различными методами

LMS-платформа – не предусмотрена

5.3. Описание контрольно-оценочных мероприятий промежуточного контроля по дисциплине модуля

5.3.1. Экзамен

Список примерных вопросов

1. Сформулируйте “правила пяти” Липински. К какому типу дескрипторов относятся дескрипторы из этих правил?

2. Какова цель проведения высокопроизводительного скрининга? Значение параллельного синтеза и комбинаторной химии для высокопроизводительного скрининга?

3. Назовите основные подходы рационального дизайна. В чем их суть?

4. Какие основные виды компьютерного дизайна биологически активных веществ выделяют? К какому виду компьютерного дизайна относится молекулярный докинг и почему?

5. Перечислите и охарактеризуйте нековалентные взаимодействия, возникающие между белком-мишенью и лигандом.

6. Виды фармакофорного поиска. В чем заключается проблема совмещения молекул при построении фармакофорных моделей?

7. Методы 3D-QSAR. В чем преимущества и недостатки данных методов?

8. Моделирование белков по гомологии. Методы выравнивания последовательностей. Идентификация и моделирование консервативных областей.

9. Моделирование белков по гомологии. Конструирование переменных областей. Моделирование боковых цепей.

10. Моделирование белков по гомологии. Метод дистанционной геометрии. Предсказание вторичной структуры. Метод протягивания.

11. Силовые поля при моделировании белков. Методы оптимизации геометрии белков. Способы учета сольватации белков.
 12. Применение молекулярной динамики для уточнения моделей белков.
 13. Валидация моделей белков. Стереохимическая корректность. Качество упаковки. Анализ достоверности укладки.
 14. Свойства моделей белков. Электростатический потенциал. Потенциалы взаимодействия. Гидрофобность.
 15. Алгоритмы докинга. Метод постепенного конструирования. Генетические алгоритмы.
 16. Алгоритмы докинга. Табу-поиск. Моделирование отжига и метод Монте-Карло.
 17. Алгоритмы докинга. Генетические алгоритмы. Метод подгонки формы.
 18. Оценочные функции. Эмпирические оценочные функции и оценочные функции, основанные на полях.
 19. Оценочные функции. Оценочные функции, основанные на знаниях. Понятие быстрых оценочных функций.
 20. Учет влияния таутомерии и ионизации при докинге.
 21. Классификация дескрипторов органических соединений. Приведите примеры дескрипторов.
- LMS-платформа – не предусмотрена

5.4 Содержание контрольно-оценочных мероприятий по направлениям воспитательной деятельности

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.