

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**  
Дизайн биологически активных соединений

**Код модуля**  
1158009(0)

**Модуль**  
Современные аспекты медицинской и  
фармацевтической химии

**Екатеринбург**

Оценочные материалы составлены автором(ами):

<b>№ п/п</b>	<b>Фамилия, имя, отчество</b>	<b>Ученая степень, ученое звание</b>	<b>Должность</b>	<b>Подразделение</b>
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:**

## 1. СТРУКТУРА И ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ **Дизайн биологически активных соединений**

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

## 2. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ИНДИКАТОРЫ) ПО ДИСЦИПЛИНЕ МОДУЛЯ **Дизайн биологически активных соединений**

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	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	Коллоквиум Лабораторные занятия Лекции Практические/семинарские занятия Экзамен

<p>полученных результатов</p>	<p>обработки и анализа результатов измерений  3-4 - Перечислить основные нормативные документы, регламентирующие оформление научно-технических отчетов и защиту прав интеллектуальной собственности  П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания экспериментальные комплексные научно-технические исследования и изыскания для решения инженерных задач в области профессиональной деятельности, включая обработку, интерпретацию и оформление результатов  У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания  У-2 - Обоснованно выбрать необходимую аппаратуру и метод исследования для решения инженерных задач, относящихся к профессиональной деятельности  У-3 - Оценивать оформление научно-технических отчетов, публикаций научных результатов, документов защиты интеллектуальной собственности на соответствие нормативным требованиям</p>	
<p>ОПК-4 -Способен разрабатывать технические объекты, системы и технологические процессы в своей профессиональной деятельности с учетом экономических, экологических, социальных ограничений</p>	<p>Д-1 - Демонстрировать креативное мышление, творческие способности  3-1 - Объяснить основные принципы функционирования разрабатываемых технических объектов, систем, технологических процессов  3-2 - Изложить принципы расчета экономической эффективности предложенных технических решений</p>	<p>Домашняя работа  Контрольная работа  Лабораторные занятия  Лекции  Практические/семинарские занятия  Экзамен</p>

	<p>З-3 - Привести примеры сравнения предложенных решений с мировыми аналогами</p> <p>З-4 - Описать основные подходы к оценке экологических и социальных последствий внедрения инженерных решений</p> <p>П-1 - Выполнять в рамках поставленного задания разработки технических объектов, систем, в том числе информационных, и технологических процессов в своей профессиональной деятельности с учетом экономических, экологических, социальных ограничений</p> <p>У-1 - Предложить нестандартные варианты разработки технических объектов, систем, в том числе информационных, и технологических процессов</p> <p>У-2 - Доказать научно-техническую и экономическую состоятельность и конкурентоспособность предложенных инженерных решений</p> <p>У-3 - Оценить экологические и социальные риски внедрения предложенных инженерных решений</p> <p>У-4 - Провести всесторонний анализ принятых инженерных решений для выполнения разработки технических объектов, систем, в том числе информационных, и технологических процессов</p>	
<p>ПК-7 -Способность организации выполнения научно-исследовательских работ по закрепленной тематик (Организация производства</p>	<p>З-3 - Описывать взаимосвязь строения молекулы лекарственного вещества с его физиологическим действием, особенностями фармакокинетики и фармакодинамики</p> <p>П-3 - Сделать вывод о принадлежности лекарственных</p>	<p>Домашняя работа Коллоквиум Лабораторные занятия Лекции Практические/семинарские занятия Экзамен</p>

лекарственных средств)	препаратов к определенным фармакологическим группам на основе информации о его физиологическом действии У-3 - Анализировать взаимосвязь строения молекулы лекарственного вещества и его физиологического действия	
------------------------	--	--

### 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

<b>1. Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – 0.6</b>		
<b>Текущая аттестация на лекциях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>контрольная работа</i>	4,7	70
<i>ведение конспекта</i>	4,9	30
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – 0.4</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лекциям – экзамен</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – 0.6</b>		
<b>2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – 0.2</b>		
<b>Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>домашняя работа</i>	4,12	60
<i>работа на занятиях</i>	4,17	40
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– 1</b>		
<b>Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям–нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– не предусмотрено</b>		
<b>3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий –0.2</b>		
<b>Текущая аттестация на лабораторных занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<i>коллоквиум</i>	4,10	40
<i>работа на занятиях</i>	4,17	30
<i>защита отчетов</i>	4,17	30

<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям -1</b>		
<b>Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям –нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям – не предусмотрено</b>		
<b>4. Онлайн-занятия: коэффициент значимости совокупных результатов онлайн-занятий –не предусмотрено</b>		
<b>Текущая аттестация на онлайн-занятиях</b>	<b>Сроки – семестр, учебная неделя</b>	<b>Максимальная оценка в баллах</b>
<b>Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по онлайн-занятиям -не предусмотрено</b>		
<b>Промежуточная аттестация по онлайн-занятиям –нет</b>		
<b>Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по онлайн-занятиям – не предусмотрено</b>		

### 3.2. Процедуры текущей и промежуточной аттестации курсовой работы/проекта

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

## 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

<b>Результаты обучения</b>	<b>Критерии оценивания учебных достижений, обучающихся на соответствие результатам обучения/индикаторам</b>
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	<p>Студент демонстрирует ответственность в освоении результатов обучения на уровне запланированных индикаторов.</p> <p>Студент способен выносить суждения, делать оценки и формулировать выводы в области изучения.</p> <p>Студент может сообщать преподавателю и коллегам своего уровня собственное понимание и умения в области изучения.</p>
-------------------	---

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

Примерные задания

1. 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.
2. 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

### 5.1.3. Лабораторные занятия

Примерный перечень тем

1. Компьютерное представление химической информации. Инструменты Obabel и KNIME для конвертации между различными представлениями
2. Компьютерное представление химической информации высокомолекулярных соединений. Инструменты BLAST и SWISS-MODEL для построения моделей по гомологии.
3. Молекулярный докинг малых молекул в отношении белка-мишени.

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

Примерный перечень тем

1. Молекулярный докинг

Примерные задания

1. Перечислите методы и известные инструменты для мишень-ориентированной разработки БАВ.
2. Чем отличаются такие принципы разработки БАВ, как введение биоизостерных групп и принципы введения фармакофорных фрагментов
3. Назовите способы для компьютерного представления двухмерных и трехмерных структур органических соединений.
4. Описать классификацию, строение, функции белков.
5. Рассмотреть регуляцию биохимических процессов при белок-лигандных взаимодействиях. Привести примеры.
6. Охарактеризовать типы оценочных функций в молекулярном докинге.
7. Рассмотреть типы алгоритмов поиска в молекулярном докинге

LMS-платформа – не предусмотрена

### 5.2.2. Коллоквиум

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

### 5.2.3. Домашняя работа

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. Какие преимущества даёт 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

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

#### **5.3.1. Экзамен**

Список примерных вопросов

1. 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? 2. Назовите основные подходы рационального дизайна. В чем их суть? 3. Какие основные виды компьютерного дизайна биологически активных веществ выделяют? К какому виду компьютерного дизайна относится докинг и почему? 4. Перечислите и охарактеризуйте нековалентные взаимодействия, возникающие между белком-мишенью и лигандом.

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.