

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

_____ С.Т. Князев
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1161174	Современные аспекты теории получения биоактивных веществ

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Ресурсосберегающие методы и технологии функциональных материалов и биоактивных веществ	Код ОП 1. 19.04.01/33.06
Направление подготовки 1. Биотехнология	Код направления и уровня подготовки 1. 19.04.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Бакулев Василий Алексеевич	доктор химических наук, профессор	Заведующий кафедрой	технологии органического синтеза
2	Безматерных Максим Алексеевич	кандидат химических наук, доцент	Доцент	технологии органического синтеза
3	Обыденнов Константин Львович	кандидат химических наук, без ученого звания	Доцент	технологии органического синтеза

Согласовано:

Управление образовательных программ

Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ **Современные аспекты теории получения биоактивных веществ**

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль включает в себя дисциплины «Современные подходы к созданию биоактивных веществ», «Дизайн биоактивных веществ». Дисциплины модуля включают в себя основные принципы дизайна, синтеза, технологических исследований получения биоактивных веществ. Большое внимание уделяется связи между структурой и биологическим действием биологически активных веществ, анализируются научные основы создания биоактивных веществ.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Современные подходы к созданию биоактивных веществ	3
2	Дизайн биоактивных веществ	3
ИТОГО по модулю:		6

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	<ol style="list-style-type: none">1. Физико-химические методы исследования функциональных материалов и биоактивных веществ2. Ресурсосберегающие аспекты в современной технологии3. Теоретические и практические подходы в химии и биотехнологии
Постреквизиты и кореквизиты модуля	<ol style="list-style-type: none">1. Физико-химические методы исследования функциональных материалов и биоактивных веществ2. Прикладные методы и технологии функциональных материалов3. Современное развитие химии и технологии функциональных материалов4. Прикладные методы и технологии функциональных материалов5. Современное развитие химии и технологии функциональных материалов

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Дизайн биоактивных веществ	<p>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</p>	<p>З-1 - Сформулировать основные принципы организации и планирования научного исследования</p> <p>З-2 - Характеризовать возможности исследовательской аппаратуры и методов исследования, используя технические характеристики и области применения</p> <p>З-3 - Сделать обзор основных методов статистической обработки и анализа результатов измерений</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания</p> <p>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</p> <p>Д-1 - Проявлять умение видеть детали, упорство, аналитические умения</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 ресурсоэффективности</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>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>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 ресурсосбережения производственного цикла и продукта</p> <p>Д-1 - Демонстрировать ответственное отношение к работе, организаторские способности</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</p>	<p>З-4 - Привести стратегии создания новых биоактивных препаратов</p> <p>У-6 - Распознавать структурные фрагменты в молекулах органических соединений, определяющие их фармакологическое действие</p> <p>П-5 - Структурировать научный поиск при синтезе новых органических соединений</p>

	фундаментальных исследований и технологических разработок	
Современные подходы к созданию биоактивных веществ	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	<p>З-1 - Сформулировать основные принципы организации и планирования научного исследования</p> <p>З-2 - Характеризовать возможности исследовательской аппаратуры и методов исследования, используя технические характеристики и области применения</p> <p>З-3 - Сделать обзор основных методов статистической обработки и анализа результатов измерений</p> <p>У-1 - Собирать и анализировать научно-техническую информацию для оптимального планирования исследования и изыскания</p> <p>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</p> <p>Д-1 - Проявлять умение видеть детали, упорство, аналитические умения</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 ресурсоэффективности производственного цикла и продукта	<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>У-1 - Технически грамотно формулировать задания по эксплуатации технологического оборудования и обеспечению технологических процессов с учетом имеющихся ограничений режимов</p>

		<p>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>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 ресурсосбережения производственного цикла и продукта</p> <p>Д-1 - Демонстрировать ответственное отношение к работе, организаторские способности</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-2 - Представлять основные аспекты химического синтеза биоактивных веществ</p> <p>У-2 - Выбирать оптимальные методы синтеза биоактивных веществ</p> <p>П-2 - Использовать методы литературного поиска новой информации по биоактивным соединениям, с привлечением современных технологий</p>

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в **очной** формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Современные подходы к созданию
биоактивных веществ

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Бакулев Василий Алексеевич	доктор химических наук, профессор	Заведующий кафедрой	технологии органического синтеза

Рекомендовано учебно-методическим советом института (отправлен в архив) Ускоренного обучения

Протокол № 2 от 10.02.2023 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Бакулев Василий Алексеевич, Заведующий кафедрой, технологии органического синтеза

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Введение	Краткая характеристика дисциплины, ее цели, задачи, объем, содержание. Порядок изучения материала, формы контроля самостоятельной работы. Характеристика учебной литературы.
P2	Теоретические аспекты выбора метода синтеза	Энергетические факторы. Классификация химических реакций. Механизм и кинетика реакций. Уравнения Гаммета, Тафтата, квантово-химические расчеты, выбор растворителя и параметров технологического процесса.
P3	Методы получения промежуточных продуктов и биоактивных веществ	Реакции электрофильного замещения: нитрование, нитрозирование, сульфирование. Препараты, содержащие сульфогруппу, значение реакций для получения лекарственных средств. Реагенты, используемые при проведении реакции сульфирования, механизм реакции. Особенности сульфирования, побочные реакции. Сульфохлорирование. Техника безопасности, экологические аспекты производства. Введение углеродных остатков в ароматическое и гетероциклическое ядро. Галогенирование. Реакции нуклеофильного замещения Технологические аспекты проведения реакций, техника безопасности, экологичность процессов производства. Получение фторорганических соединений Общие методы получения фторорганических соединений.

		Синтез лекарственных средств. Основные концепции комбинаторной химии. Твердофазный синтез. Метод параллельных синтезов.
P5	Подходы к синтезу гетероциклических соединений с трех- и четырехчленными циклами	Синтез производных циклопропана, оксирана, азиридина и азирина. Получение лактамов, тиа- и азалактамов. Синтез производных пенициллина, цефалоспорины, тиотефа и бензтиотефа. Перегруппировки и трансформации трехчленных гетероциклов.
P6	Подходы к синтезу пятичленных и шестичленных гетероциклов и макроциклов	Синтез производных пиррола, фурана, тиофена, имидазола, пиразола, оксазола, тиазола, имидазола, пиразола, оксатиола и дитиола. Особенности синтеза пиридина, пиримидина и других шестичленных гетероциклов. Синтез и технологические особенности получения макроциклов.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

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

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Современные подходы к созданию биоактивных веществ

Электронные ресурсы (издания)

1. , Яковлев, И. П.; Органическая химия : учебник : учебник.; Директ-Медиа, Москва; 2022; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=683112> (Электронное издание)
2. Горленко, В. А.; Органическая химия для бакалавров-биологов : учебное пособие. 2. ; Московский педагогический государственный университет (МПГУ), Москва; 2016; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=598945> (Электронное издание)
3. Горленко, В. А.; Органическая химия для бакалавров-биологов : учебное пособие. 1. ; Московский педагогический государственный университет (МПГУ), Москва; 2016; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=598944> (Электронное издание)
4. Ким, А. М.; Органическая химия : учебное пособие.; Сибирское университетское издательство, Новосибирск; 2004; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=57255> (Электронное издание)
5. Уломский, Е. Н.; Основы теоретических представлений в органической химии : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2017; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=696269> (Электронное издание)
6. Анисимова, , Н. А.; Химия гетероциклических соединений. Ч.1. Основы номенклатуры. Моногетероциклические соединения с одним гетероатомом : учебное пособие.; Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Санкт-Петербург; 2017; <http://www.iprbookshop.ru/102591.html> (Электронное издание)
7. Оганесян, Э. Т.; Органическая химия : учебник.; Феникс, Ростов-на-Дону; 2020; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=601647> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Юровская, М.А.; Основы органической химии : учеб. пособие для студентов, обучающихся по специальности 020101.65 - Химия и по направлению 020100.62 - Химия.; БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва; 2012 (5 экз.)
2. Мокрушин, В. С., Вавилов, Г. А.; Основы химии и технологии биоорганических и синтетических лекарственных веществ : Учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальностям "Хим. технология орган. веществ", "Хим. технология синтез. биологически активных веществ", "Биотехнология".; УГТУ-УПИ, Екатеринбург; 2004 (29 экз.)
3. Смит, В. А., Дильман, А. Д.; Основы современного органического синтеза; БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва; 2009 (4 экз.)
4. Смит, В. А.; Основы современного органического синтеза; БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва; 2009 (21 экз.)
5. Смит, В. А., Бочков, А. Ф., Кейпл, Р.; Органический синтез. Наука и искусство; Мир, Москва; 2001 (3 экз.)
6. Джоуль, Джоуль Дж., Миллс, Милс К., Зайцева, Ф. В., Карчава, А. В., Юровская, М. А.; Химия гетероциклических соединений : [учебник].; Мир, Москва; 2004 (5 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

American Chemical Society (ACS Publications) (J.Org.Chem, Org.Lett., J.Am.Chem.Soc., Chem.Rev.):
www.pubs.acs.org

eLibrary ООО Научная электронная библиотека: <http://elibrary.ru>

Web of Science: <https://www.webofknowledge.com>

REAXYS, Reaxys Medicinal Chemistry, Elsevier: <http://www.reaxys.com>

ScienceDirect Freedom Collection, Elsevier: <http://www.sciencedirect.com/>

Scopus, Elsevier: <http://www.scopus.com/>

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Портал информационно-образовательных ресурсов УрФУ www.study.urfu.ru

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Современные подходы к созданию биоактивных веществ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия) Браузер Google Chrome или Mozilla Firefox
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия) Браузер Google Chrome или Mozilla Firefox
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия) Браузер Google Chrome или Mozilla Firefox
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия) Браузер Google Chrome или Mozilla Firefox
5	Самостоятельная работа студентов	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия)

		соответствии с количеством студентов Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Браузер Google Chrome или Mozilla Firefox
--	--	--	---

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Дизайн биоактивных веществ

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ 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

Рекомендовано учебно-методическим советом института (отправлен в архив) Ускоренного обучения

Протокол № 2 от 10.02.2023 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- **Безматерных Максим Алексеевич, Доцент, технологии органического синтеза**
- **Обыденнов Константин Львович, Доцент, технологии органического синтеза**

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
P1	Введение	Введение в дисциплину. Предмет курса. Основные понятия, используемые при создании биологически активных веществ. Основные этапы разработки биологически активных веществ. Требования к лекарствам. Типичные причины отклонения лекарственных препаратов на различных этапах разработки и испытаний.
P2	Эмпирический подход, как основа для создания биологически активных веществ	Эмпирический подход, от случайного открытия до высокопроизводительного скрининга. Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании биологически активных веществ. Основы метода. Основные понятия и подходы. Использование библиотек соединений. Основы комбинаторной химии.
P3	Умозрительный подход, как основа для создания биологически активных веществ	Основные понятия и принципы при умозрительном подходе. Соединение лидер, критерии. Понятие пролекарств. Понятие антиметаболита. Понятие фармакофорной группы. Понятие биоизостерной группы. Понятие привилегированной структуры.
P4	Компьютерный дизайн, как основа для создания биологически активных соединений	Лиганд-ориентированный и структурно-ориентированный молекулярный дизайн соединения лидера. Основные понятия виртуального скрининга. Воронка виртуального скрининга и её компоненты. Дизайн библиотек соединений для виртуального скрининга. Понятие структурного разнообразия. Виды библиотек. Методы генерации на компьютере библиотек.

		Методы работы с моделями белков, как основных мишеней для биологически активных соединений.
P5	Виртуальный скрининг на основе лиганд-ориентированного подхода	Алгоритм виртуального скрининга химических соединений. Основные фильтры для виртуального скрининга. Понятие «лекарствоподобия» и «лидероподобия». Структурные фильтры. Фармакофорный поиск с использованием структуры лиганда. Способы определения фармакофора. Ранжирование структур после виртуального скрининга. Подход Ханша. Дескрипторы. Классификация дескрипторов. Общие принципы построения моделей QSAR. Виртуальный скрининг на основе моделей SAR. Основные методы 3D-QSAR для лиганд-ориентированного подхода. Методы выравнивания молекул.
P6	Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы	Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы. Основные подходы, используемые при таком типе скрининга. Методы 3D-QSAR для подхода, основанного на структуре биомолекулы. Построение трехмерных фармакофоров и их использование в качестве фильтра. Фармакофорный поиск с использованием структуры.
P7	Метод докинга	Основные виды нековалентных взаимодействий. Понятие свободной энергии связывания. Понятие оценочной функции. Виды оценочных функций. Метод докинга. Основные алгоритмические подходы, используемые для докинга. Этапы проведения докинга: подготовка биомишени, валидация метода. Понятие редокинга и кросс-докинга. Виртуальный скрининг на основе докинга.

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

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

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Дизайн биоактивных веществ

Электронные ресурсы (издания)

1. Лисневская, И. В.; Строение вещества : учебник.; Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Таганрог; 2021; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=691298> (Электронное издание)
2. Лахно, В. Д., Лахно, В. Д., Устинова, М. Н.; Компьютеры и суперкомпьютеры в биологии; Регулярная и хаотическая динамика, Ижевский институт компьютерных исследований, Москва, Ижевск; 2008; <http://www.iprbookshop.ru/16543.html> (Электронное издание)
3. Порозов, Ю. Б.; Биоинформатика; Университет ИТМО, Санкт-Петербург; 2012; <http://www.iprbookshop.ru/65798.html> (Электронное издание)

4. Володченкова, Л. А.; Биоинформатика : учебное пособие.; Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского (ОмГУ), Омск; 2018; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=563147> (Электронное издание)
5. Дьяконов, В. П.; MATLAB 6.5 SP1/7/7 SP1/7 SP2 + Simulink 5/6. Инструменты искусственного интеллекта и биоинформатики : практическое пособие.; СОЛОН-ПРЕСС, Москва; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=117721> (Электронное издание)
6. Дьяконов, В. П.; MATLAB 6.5 SP1/7/7 SP1/7 SP2 + Simulink 5/6. Инструменты искусственного интеллекта и биоинформатики; СОЛОН-ПРЕСС, Москва; 2017; <http://www.iprbookshop.ru/90271.html> (Электронное издание)
7. Игнасимуту, С., Чумичкин, А. А.; Основы биоинформатики; Регулярная и хаотическая динамика, Институт компьютерных исследований, Москва, Ижевск; 2019; <http://www.iprbookshop.ru/91970.html> (Электронное издание)
8. Нейн, Ю. И.; Компьютерное представление химической информации : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2020; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=699083> (Электронное издание)
9. Нейн, Ю. И.; Компьютерное представление химической информации : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2020; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=611086> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Дьяконов, В. П., Круглов, В. В.; MATLAB 6.5 SP1/7/7 SP1/7 SP2 + Simulink 5/6. Инструменты искусственного интеллекта и биоинформатики; СОЛОН-ПРЕСС, Москва; 2006 (3 экз.)
2. Игнасимуту, С., Чумичкин, А. А.; Основы биоинформатики; Институт компьютерных исследований : Регулярная и хаотическая динамика, Москва ; Ижевск; 2007 (3 экз.)
3. Цирельсон, В. Г.; Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по химико-технологическим направлениям и специальностям.; БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва; 2010 (6 экз.)
4. Прохорова, П. Е., Прохоров, Моржерин, Ю. Ю., Глухарева, Т. Г.; ЯМР-спектроскопия. Методы определения структуры органических соединений : учебное пособие.; УрФУ, Екатеринбург; 2010 (3 экз.)
5. Бакулев, В. А., Моржерин, Ю. Ю., Субботина, Ю. О., Мокрушин, В. С.; Квантово-химические расчеты органических молекул : метод. указания по проведению квантово-хим. расчетов в пакете программ CHEMOFFICE/CHEM3D курсов "Квантовая химия", "Компьютер. системы в химии и технологии" для студентов всех форм обучения специальностей 240901, 240401.; УГТУ-УПИ, Екатеринбург; 2006 (3 экз.)
6. Нейн, Ю. И., Моржерин, Ю. Ю., Глухарева, Т. В.; Квантово-химические расчеты органических молекул : учеб.-метод. пособие.; УрФУ, Екатеринбург; 2010 (3 экз.)
7. Нейн, Ю. И., Костерина, М. Ф.; Компьютерное представление химической информации : учебное пособие для студентов вуза, обучающихся по направлениям подготовки 18.03.01 "Химическая технология", 19.03.01 "Биотехнология".; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2020 (10 экз.)
8. Мокрушин, В. С., Вавилов, Г. А.; Основы химии и технологии биоорганических и синтетических лекарственных веществ : Учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальностям "Хим. технология орган. веществ", "Хим. технология синтез. биологически активных веществ", "Биотехнология".; УГТУ-УПИ, Екатеринбург; 2004 (29 экз.)

9. , Тарасов, Е. В., Моржерин, Ю. Ю., Мокрушин, В. С.; Пакет ISIS TM графический редактор структурных химических формул ISISDRAW. Химическая база данных ISISBASE : метод. указания по работе в пакете ISIS TM курса "Компьютерные системы в химии и технологии" для студентов [вузов] всех форм обучения специальностей 240901 - Биотехнология, 240401 - Хим. технология орган. веществ.; УГТУ-УПИ, Екатеринбург; 2006 (3 экз.)

10. Леск, А., Миронов, А. А., Швядос, В. К.; Введение в биоинформатику : [учебник].; БИНОМ. Лаборатория знаний, Москва; 2013 (10 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Зональная библиотека УрФУ – <http://lib.urfu.ru/>.

Центр биоинженерии РАН – <http://www.biengi.ac.ru/>.

Единое окно доступа к информационным ресурсам – <http://window.edu.ru/>

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Интернет-журнал «Коммерческая биотехнология» – <http://cbio.ru/>.

Научный электронный журнал «Живые системы» – <http://biorf.ru/>.

Журнал «Биотехнология» – <http://www.genetika.ru/journal/>.

Журнал «Nature» – <http://www.nature.com/index.html>.

Журнал «Science» – www.sciencemag.org/.

Журнал «Biotechnology: theory and practice» – <http://www.biotechlink.org/>.

Журнал «Biotechnology Advances» – <http://www.journals.elsevier.com/biotechnology-advances/>.

Журнал «Current Opinion in Biotechnology» – <http://www.journals.elsevier.com/current-opinion-in-biotechnology/>.

Журнал «Journal of Biotechnology» – <http://www.journals.elsevier.com/journal-of-biotechnology/>.

Научная электронная библиотека eLibrary.ru – <http://elibrary.ru>.

Научная электронная библиотека КиберЛенинка – <http://cyberleninka.ru/>.

Биотехнологический портал – <http://bio-x.ru/>.

Общество биотехнологов России – <http://www.biorosinfo.ru>

Online chemical modeling environment - <https://ochem.eu/home/show.do>

Virtual Computational Chemistry Laboratory - <http://www.vcclab.org>

База данных PDB - <https://www.rcsb.org/>

База данных ZINC - <http://zinc.docking.org/>

Драг-дизайн: как в современном мире создаются новые лекарства - <https://biomolecula.ru/articles/drag-dizain-kak-v-sovremennom-mire-sozdaiutsia-novye-lekarstva>

Национальный центр биотехнологической информации США (NCBI: обслуживает GenBank, MedLine, BLAST) – www.ncbi.nlm.nih.gov.

Сервер центра моделирования молекулярных структур: нуклеиновые кислоты, белки, низкомолекулярные соединения – <http://cmm.info.nih.gov/modeling/>.

Национальный институт генома человека, США – <http://www.nhgri.nih.gov>.

Европейская лаборатория молекулярной биологии (EMBL), банк данных ДНК и белко-вых последовательностей EMBL – www.embl-heidelberg.de, <http://www.embl.de/>.

Базы данных ДНК и белковых последовательностей: PIR (<http://pir.georgetown.edu/>) и FASTA (http://fasta.bioch.virginia.edu/fasta_www2/fasta_list2.shtml).

База данных по трехмерным структурам белков (PDB) – <http://www.rcsb.org>.

Сайт компании GeneBio (Geneva Bioinformatics S.A.), распространяющей информацию из протеомных баз данных: SWISS-PROT, PROSITE, SWISS-2DPAGE и соответствующие программные приложения, разработанные в институте по биоинформатике Швейцарии (Swiss Institute of Bioinformatics) – www.genebio.com.

Международная база данных по первичной структуре и функциям белков (SWISS-PROT), 3D структуры ферментов – www.swissprot.com, http://web.expasy.org/docs/swiss-prot_guideline.html.

База данных по 2-мерному электрофорезу различных белков в полиакриламидном геле – <http://world-2dpage.expasy.org/swiss-2dpage/>.

Список доступных через Интернет (некоторые – в свободном доступе) баз данных по молекулярной биологии и геномике – <http://www.oxfordjournals.org/nar/database/a/%22>.

Карта биохимических метаболических путей – <http://web.expasy.org/pathways/>.

Биохимическая классификация и номенклатура ферментов. Свободный доступ на сайте Международного союза биохимии и молекулярной биологии – www.chem.qmul.ac.uk/iubmb.

База данных по свойствам ферментов – <http://enzyme.expasy.org/>.

Молекулярная биология клетки – <http://lib.e-science.ru/book/104/cont/>.

Генетическая инженерия – http://msu-genetics.ru/teaching/specificity/genetic_engineering.htm.

Сервер компании "Celera" – <http://celera.com/>.

Интегрированная система информационных ресурсов РАН – <http://isir.ras.ru/>.

Всероссийский институт научной и технической информации (ВИНИТИ РАН) – <http://www.viniti.msk.su/>.

Учебники, научные монографии, обзоры, лабораторные практикумы в свободном до-ступе на сайте практической молекулярной биологии – www.molbiol.ru, www.nature.ru.

База знаний по биологии человека – <http://humbio.ru/>.

Биоинформатика – <http://www.bioinformatix.ru/>.

Институт молекулярной генетики РАН – <http://www.img.ras.ru/library/>.

МФТИ, факультет молекулярной и биологической физики – <http://bio.fizteh.ru/>.

Институт молекулярной биологии им. Энгельгардта – ведущая организация российской программы геномных исследований – <http://www.eimb.relarn.ru/>.

Лаборатория секвенирования и картирования генома человека Института молекулярной биологии им. Энгельгардта – <http://www.seqmap.newmail.ru/>.

Институт биологии гена РАН – <http://www.ras.ru/biogen/ibg.html>.

Институт биоорганической химии РАН – <http://www.ibch.ru/>.

Институт цитологии и генетики СО РАН – <http://www.bionet.nsc.ru/>.

Сервер лаборатории теоретической генетики СО РАН – <http://www.mgs.bionet.nsc.ru/>.

Пушкинский научный центр РАН – <http://www.psn.ru/>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Дизайн биоактивных веществ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия) Google Chrome
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Периферийное устройство Подключение к сети Интернет	Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия) Google Chrome
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия)

		<p>соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Google Chrome</p>
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия)</p> <p>Google Chrome</p>
5	Самостоятельная работа студентов	<p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Доска аудиторная</p> <p>Периферийное устройство</p> <p>Подключение к сети Интернет</p>	<p>Р7-Офис Профессиональный (Десктопная версия)</p> <p>Google Chrome</p>