

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

по учебной работе

_____ Э.Ю. Майкова
« _____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

элективной дисциплины, части формируемой участниками образовательных
отношений Блока 1 «Дисциплины (модули)»

«Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) – Медицинская и фармацевтическая химия

Тип задач профессиональной деятельности – научно-исследовательский

Форма обучения – очная

Химико-технологический факультет

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Тверь 20__

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки бакалавров в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:
профессор кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС
« ____ » _____ 20 __ г., протокол № ____.

Заведующий кафедрой

М.Г. Сульман

Согласовано:
Начальник учебно-методического
отдела УМУ

Д.А.Барчуков

Начальник отдела
комплектования
зональной научной библиотеки

О.Ф. Жмыхова

1. Цель и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов» является получение знаний в области современных программных средств и методов моделирования химических структур лекарственных препаратов, а также процессов их синтеза.

Задачами дисциплины являются:

- формирование представления о математическом и компьютерном моделировании химических молекул и кристаллических структур; об основных подходах построения компьютерных моделей молекул и исследовании их термодинамических свойств;

- формирование способности ориентироваться в программных средствах, применяемых в моделировании химических структур; применять методы компьютерного моделирования при планировании экспериментов и обработке полученных результатов;

- формирование навыков компьютерного моделирования молекул органических структур и расчета их термодинамических свойств; обработки научных данных; работы с современным программным обеспечением.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к элективным дисциплинам, части формируемой участниками образовательных отношений Блока 1 ОП ВО. Для изучения курса требуются знания, полученные студентами при изучении дисциплин: «Органическая химия», «Биологически активные соединения растительного и животного происхождения», «Информатика», «Математика», «Квантовая механика и квантовая химия», «Строение вещества», «Медицинская и фармацевтическая химия».

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем при подготовке выпускной квалификационной работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1 Планируемые результаты обучения по дисциплине

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

ПК-1. Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИПК-1.3. *Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач научно-исследовательской работы.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

31.1. Основы выбора методов исследования структуры молекул лекарственных препаратов с использованием компьютерных средств.

Уметь:

У1.1. Обоснованно выбирать специализированные компьютерные программы и средства для моделирования молекул лекарственных препаратов и исследования их физико-химических и термодинамических свойств.

Иметь опыт практической подготовки:

ПП1.1. Использовать специализированные компьютерные программы и средства для моделирования фармацевтических препаратов.

Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:

ПК-2. Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы.

Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:

ИПК-2.1. *Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных).*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

32.1. Современные программные и компьютерные средства, используемые в моделировании молекул и химических процессов.

32.2. Основы корреляции «структура-активность» для разработки и синтеза лекарственных препаратов.

Уметь:

У2.1. Анализировать и обоснованно выбирать программные и компьютерные средства, используемые в моделировании молекул и химических процессов.

Иметь опыт практической подготовки:

ПП2.1. Проводить анализ и обобщение результатов поисковых экспериментов для последующей машинной обработки, в том числе с использованием специализированных компьютерных программ.

ИПК-2.2. *Выполняет сбор, обработку, анализ и обобщение результатов экспериментов и исследований в области химии.*

Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций

Знать:

33.1. Основы анализа и обработки результатов поисковых экспериментов в области фармацевтической химии с использованием вычислительных средств, в том числе специализированных.

Уметь:

У3.1. Применять методы математического и компьютерного моделирования при обработке результатов поисковых экспериментов в области фармацевтической химии.

Иметь опыт практической подготовки:

ПП3.1. Использовать специализированные компьютерные программы и средства для анализа и обработки результатов поисковых экспериментов в области фармацевтической химии.

3.2. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных занятий, лабораторных занятий; самостоятельная работа под руководством преподавателя.

4. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
Общая трудоемкость дисциплины	3	108
Аудиторные занятия (всего)		90
В том числе:		
Лекции		30
Практические занятия (ПЗ)		не предусмотрены
Лабораторные работы (ЛР)		60
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		18
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы (реферат)		5
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к лабораторным работам		8
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		5
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		не предусмотрен
Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего)		65
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы (реферат)		5
Практические занятия (ПЗ)		не предусмотрены
Лабораторные работы (ЛР)		60

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули дисциплины, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. практикум	Сам. работа
1	Введение. Современные проблемы применения математических методов моделирования в химии	7	2	-	4	1
2	Компьютерное кодирование химических соединений	13	4	-	8	1
3	Расчетные методы компьютерной химии. Изучение термодинамических параметров молекул	21	4	-	14	3

4	Общие понятия о задаче корреляции структура-свойство и структура-активность.	7	4	-	-	3
5	Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований и моделирования структур лекарственных препаратов	14	4	-	6	4
6	Исследование механизмов протекания реакции с использованием ЭВМ	21	4	-	14	3
7	Компьютерное планирование органического синтеза	21	4	-	14	3
Всего на дисциплину		108	30	-	60	18

5.2. Содержание дисциплины

МОДУЛЬ 1 «ВВЕДЕНИЕ. СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ПРИМЕНЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ В ХИМИИ»

Введение. Современные проблемы применения математических методов моделирования в химии. Тенденции развития вычислительной техники и ее применения для физико-химических исследований.

МОДУЛЬ 2 «КОМПЬЮТЕРНОЕ КОДИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»

Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры; линейные формулы Висвиссера, кодирование в системе VIBIGON; таблицы смежности и матрицы связности.

МОДУЛЬ 3 «РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ. ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МОЛЕКУЛ»

Расчетные методы компьютерной химии. Изучение термодинамических параметров химических соединений: концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул; метод молекулярной динамики (общие принципы); метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов; метод Монте-Карло, квантовые методы исследования.

МОДУЛЬ 4 «ОБЩИЕ ПОНЯТИЯ О ЗАДАЧИ КОРРЕЛЯЦИИ СТРУКТУРА- СВОЙСТВО И СТРУКТУРА-АКТИВНОСТЬ»

Общие понятия о задачи корреляции структура- свойство и структура-активность. Методы корреляции, основанные на теории распознавания образов, регрессионных зависимостях и квантовых моделях молекул.

МОДУЛЬ 5 «ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУР ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ»

Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований. Экспертные системы, фреймы и семантические сети.

МОДУЛЬ 6 «ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВМ»

Применение ЭВМ для расчетов кинетических параметров. Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, планирование кинетических экспериментов, обратная задача химической кинетики (виды параметрической идентификации в зависимости от имеющихся представлений), метод решения обратной задачи химической кинетики (построение целевых функций). Математическое моделирование химико-технологических процессов. Решение прямой задачи химической кинетики.

МОДУЛЬ 7 «КОМПЬЮТЕРНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА»

Компьютерное планирование органического синтеза. Формально-логические и эмпирические методы планирования. Синтетический и ретросинтетический подходы.

5.3. Лабораторные работы

Таблица 3. Лабораторные работы и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели лабораторных работ	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость в часах
Модуль 1. Цель: знакомство с основными понятиями компьютерной химии	1. Вводное занятие, инструктаж по технике безопасности при работе на ЭВМ. 2. Повторение основных понятий вычислительной математики и базовых языков программирования.	4
Модуль 2. Цель: ознакомление с основными компьютерными программами, используемыми в химии	1. Знакомство с компьютерными программами, используемыми в химии и химической технологии. Интерфейсы программ. 2. Построение молекулярных графов.	8
Модуль 3. Цель: формирование навыков работы с программами по моделированию химических	1. Исследование термодинамических параметров молекул биологически активных веществ. Измерение валентных и торсионных углов.	14

молекул	<p>2. Применение метода сравнения площадей для анализа общих фрагментов молекул. Изучение визуализации молекул и получение информации о конформации электронных облаков в сложных молекулах.</p> <p>3. Изучение программы SpinWorks 2.53.</p> <p>4. Рисование молекул в программах ChemSketch и ISIS Draw.</p>	
<p>Модуль 5. Цель: изучение методов искусственного интеллекта</p>	<p>1. Применение компьютерных сетей для получения термодинамических и кинетических данных о биологически активных веществах.</p>	6
<p>Модуль 6. Цель: изучение компьютерных методов решения кинетических задач и установления механизма процесса</p>	<p>1. Изучение интерфейса программы «Экспериментальная установка - ЭВМ». Правила ввода кинетических данных в программу.</p> <p>2. Решение задачи параметрической идентификации кинетических моделей на примере реакций селективного гидрирования.</p> <p>3. Изучение методов исследования поведения целевой функции при параметрической идентификации. Работа с электронным учебником по методам оптимизации.</p> <p>4. Решение задач с применением ЭВМ на определение пути протекания химических реакций.</p> <p>5. Изучение программы «Кинетика».</p>	14
<p>Модуль 7. Цель: формирование навыков компьютерного планирования эксперимента и математического моделирования химико-технологических процессов</p>	<p>1. Построение деревьев синтеза биологически активных веществ с применением синтетического подхода.</p> <p>2. Расчет теплоты образования полуэмпирическими квантовыми методами</p> <p>3. Оптимизация геометрии молекул методом молекулярной динамики.</p> <p>4. Изучение программы ArgusLab.</p> <p>5. Изучение программы ChemMaths.</p> <p>6. Изучение программы Avogadro.</p> <p>7. Изучение формально-логического подхода компьютерного планирования органического синтеза</p>	14

5.4. Практические занятия

Учебным планом практические занятия не предусмотрены.

6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

6.1. Цели самостоятельной работы

Основными целями самостоятельной работы бакалавров является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых, рациональных и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в изучении отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендуемой им учебной литературе, в подготовке к лабораторным занятиям, к текущему контролю успеваемости; подготовке к зачету.

После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, студентам выдаются задания на лабораторные работы и выдаются возможные темы рефератов в рамках предметной области дисциплины. Лабораторные работы охватывают модули 1, 2, 3, 5, 6, 7. В рамках дисциплины выполняется 18 лабораторных работ, которые защищаются устным опросом. Выполнение всех лабораторных работ обязательно.

Для подготовки рефератов, студенты из предложенного перечня выбирают определенную тему, при этом студентом может быть предложена и своя тематика. Тематика реферата должна иметь проблемный и профессионально ориентированный характер, требующей самостоятельной творческой работы студента. Студенты готовят печатный вариант реферата, делают по нему презентацию (в Power Point) и доклад перед студентами группы.

Студенты выполняют задания в часы СРС в течение семестра в соответствии с освоением учебных разделов. Защита выполненных заданий производится поэтапно в часы лабораторных занятий. Оценивание осуществляется путем устного опроса проводится по содержанию и качеству выполненного задания.

Таблица 4. Темы рефератов

№ п/п	Модули	Возможная тематика самостоятельной реферативной работы
1.	Модуль 3	<ol style="list-style-type: none">1. Методы численного эксперимента.2. Методы молекулярной динамики и оптимизации геометрии молекулы.3. Не эмпирические и полуэмпирические квантовые методы. Расчеты геометрии и энергии молекул.4. Распознавание образов в химии.5. Современные математические методы обработки спектроскопической информации.6. Современные пакеты программ, применяемые в химии.

2	Модуль 4	<ol style="list-style-type: none"> 1. Корреляция, структура, активность препарата на основе топологического подхода. 2. Корреляция, структура, активность препарата на основе физико-химических свойств (работа Гаммета). 3. Применение современных пакетов программ для исследования термодинамических параметров биологически активных соединений. 4. Расчет зависимости структура-свойство (биологическая активность) с помощью специализированных пакетов программ.
3	Модуль 6	<ol style="list-style-type: none"> 1. Моделирование химической кинетики. Решение обратной задачи. 2. Применение экспертной системы в гетерогенном катализе. 3. Выявление механизма протекания каталитического процесса на основании кривых «состав катализата - время реакции».
4	Модуль 7	<ol style="list-style-type: none"> 1. Гетеросинтетический подход к коммуникативному планированию органического синтеза. 2. Иерархический подход к моделированию химико-технологических процессов. 3. Планирование эксперимента и получение статической информации в исследовании. 4. Формально-логический подход к коммуникативному планированию органического синтеза. 5. Эмпирический подход к коммуникативному планированию органического синтеза.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература по дисциплине

1. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия : в составе учебно-методического комплекса / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. - Москва : Солон - Пресс, 2005. - 535 с. : ил. - (Библиотека студента) (УМК-У). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-98003-188-X : 274 р. 94 к. - (ID=59885-10)

2. Гумеров, А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов по направлениям подготовки "Химическая технология" и "Энерго- и ресурсообеспечивающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / А.М. Гумеров. - 2-е изд. ; перераб. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 25.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1533-5. - URL: <https://e.lanbook.com/book/211445> . - (ID=106016-0)

3. Кафаров, В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учебное пособие для вузов / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. - Москва : Юрайт, 2022. - 399, [1] с. - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-534-07524-3. - URL: <https://urait.ru/bcode/493798> . - (ID=150445-0)

7.2. Дополнительная литература по дисциплине

1. Косивцов, Ю.Ю. Применение ЭВМ в химии, химической технологии и биотехнологии : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / Ю.Ю. Косивцов, А.И. Сидоров, В.В. Алферов; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2005. - 142 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр. : с. 142. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0313-9 : [б. ц.]. - (ID=59422-107)

2. Манаенков, О.В. Моделирование структур химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem : учеб. пособие для студентов направлений подготовки 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 240700 Биотехнология и спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / О.В. Манаенков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - Сервер. - Текст: электронный. - ISBN 978-5-7995-0681-0: 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/99468> . - (ID=99468-1)

3. Манаенков, О.В. Моделирование структур химических соединений с помощью пакетов программ ACD/Chemsketch, Chemoffice, Hyperchem : учеб. пособие для студентов направлений подготовки 240100 Хим. технология, 020100 Химия, 240700 Биотехнология и спец. 020201 Фундамент. и прикл. химия / О.В. Манаенков, Ю.Ю. Косивцов, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2013. - 84 с. : ил. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0681-0 : [б. ц.]. - (ID=100791-71)

4. Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учеб. пособие / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. - Москва : Академкнига, 2006. - 416 с. : ил. - (Учебное пособие для вузов). - Библиогр. : с. 413 - 415. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-94628-268-9 : 323 р. - (ID=60797-10)

5. Марков, Ю.Г. Математические модели химических реакций : учебник / Ю.Г. Марков, И.В. Маркова. - СПб. [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 12.08.2022. - ISBN 978-5-8114-1483-3. - URL: <https://e.lanbook.com/book/211436> . - (ID=111304-0)

6. Молекулярное моделирование: теория и практика : в составе учебно-методического комплекса / Х.Д. Хельтье [и др.]. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 318 с. : ил. - (Медицинская химия) (УМК-У). - Библиогр. : с. 310 - 312. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-9963-0156-0 : 443 р. 52 к. - (ID=81207-18)

7. Компьютерное моделирование биотехнологических процессов и систем : учеб. пособие / Д.С. Дворецкий [и др.]; Тамбовский государственный технический университет. - Тамбов : Тамбовский гос. техн. ун-т, 2005. - Внешний сервер. - Текст : электронный. - URL: http://window.edu.ru/window/library?p_mode=1&p_rid=38011&p_rubr=2.2.75.3 . - (ID=76676-0)

7.3. Методические материалы

1. Компьютерное моделирование лекарственных препаратов. Работа с комплексным программным пакетом ACD/ChemSketch 5.11 : учеб.-метод. пособие по спец. 020101 "Химия" : в составе учебно-методического комплекса / сост. О.В. Манаенков ; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2010. - 18 с. - (УМК-М). - CD. - Сервер. - Текст : непосредственный. - Текст : электронный. - [б. ц.]. - (ID=82393-3)

2. Указания к лабораторным занятиям по дисциплине по выбору вариативной части профессионального цикла СЗ.ДВ.1 «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов» по направлению подготовки специалистов 020201 Фундаментальная и прикладная химия специализация «Фармацевтическая химия» : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; разработ. Ю.Ю. Косивцов. - Тверь : ТвГТУ, 2014. - (УМК-ЛР). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/103038> . - (ID=103038-1)

3. Курсовая работа по дисциплине по выбору вариативной части профессионального цикла СЗ.ДВ.1 «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов» по направлению подготовки специалистов 020201 Фундаментальная и прикладная химия специализация «Фармацевтическая химия» : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; разработ. Ю.Ю. Косивцов. - Тверь : ТвГТУ, 2014. - (УМК-КП). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/103039> . - (ID=103039-1)

7.4. Программное обеспечение по дисциплине

Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

Microsoft Office 2007 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

Avogadro 1.0.1 (Freeware version) - 3D визуализация.

Кинетика v1.2.

ACD ChemSketch 10 (Freeware version).

SpinWorks 2.53.

Model ChemLab 2.6.2.

3D Angles 3.0.

«Экспериментальная установка-ЭВМ».

ISIS Draw 2.4 (Freeware version).

ArgusLab 4.0.1 (Freeware version).

7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>
2. ЭК ТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>
3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>
4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>

5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>
6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ": сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.). Диск 1, 2, 3, 4. - М.: Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст: электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/121520>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных занятий, проведения защит и презентаций курсовых работ оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

Для проведения лабораторных работ имеются лаборатории с персональными компьютерами (наличие локальной вычислительной сети обязательно).

9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена

Учебным планом экзамен по дисциплине не предусмотрен.

9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета

1. Вид промежуточной аттестации в форме зачета.

Вид промежуточной аттестации устанавливается преподавателем:

по результатам текущего контроля знаний и умений обучающегося без дополнительных контрольных испытаний;

по результатам выполнения дополнительного итогового контрольного испытания при наличии у студентов задолженностей по текущему контролю.

2. При промежуточной аттестации без выполнения дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке описываются критерии проставления зачёта:

«зачтено» - выставляется обучающемуся при условии выполнения им всех контрольных мероприятий: посещение лекций в объеме не менее 80%

контактной работы с преподавателем, выполнения и защиты заданий на практических занятиях.

При промежуточной аттестации с выполнением заданий дополнительного итогового контрольного испытания студенту выдается билет с вопросами и задачами.

Число заданий для дополнительного итогового контрольного испытания - 20.

Число вопросов – 3 (2 вопроса для категории «знать» и 1 вопрос для категории «уметь»).

Продолжительность – 60 минут.

3. Шкала оценивания промежуточной аттестации – «зачтено», «не зачтено».

4. Критерии выполнения контрольного испытания и условия проставления зачёта:

для категории «знать» (бинарный критерий):

ниже базового - 0 балл;

базовый уровень – 1 балла;

критерии оценки и ее значение для категории «уметь» (бинарный критерий):

отсутствие умения – 0 балл;

наличие умения – 1 балла.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

5. Для дополнительного итогового контрольного испытания студенту в обязательном порядке предоставляется:

база заданий, предназначенных для предъявления обучающемуся на дополнительном итоговом контрольном испытании (типовой образец задания приведен в Приложении);

методические материалы, определяющие процедуру проведения дополнительного итогового испытания и проставления зачёта.

6. Задание выполняется письменно и с использованием ЭВМ. При ответе на вопросы зачета допускается использование справочного материала и персонального компьютера с установленным программным обеспечением, не подключенного к сети Internet, при решении задач.

7. База заданий, предъявляемая обучающимся на зачете:

1. Современные проблемы применения методов моделирования в химии.

2. Тенденции развития вычислительной техники и ее применения для химических исследований.

3. Расчетные методы компьютерной химии.

4. Компьютерное кодирование химических соединений: расширение стандартной номенклатуры.

5. Применение методов искусственного интеллекта для физико-химических исследований.

6. Принципы математического моделирования химико-технологических процессов.

7. Экспертные системы, фреймы и семантические сети.

8. Экспертные системы в химии.

9. Изучение методов исследования поведения целевой функции при параметрической идентификации.

10. Конструирование расчетной ячейки для термодинамических систем. Расчет термодинамических величин методом молекулярной динамики.

11. Концепции использования расчетных методов для определения термодинамических параметров молекул.

12. Изучение термодинамических параметров химических соединений.

13. Использование метода инкрементов для расчета термодинамических параметров молекул.

14. Общие понятия о задаче корреляции структура- свойство и структура-активность.

15. Общие подходы теории корреляция структура – фармакологическая активность (QSAR).

16. Методы корреляции, основанные на теории распознавания образов.

17. Методы корреляции, основанные на регрессионных зависимостях и квантовых моделях молекул.

18. Общие принципы метода молекулярной динамики.

19. Метод молекулярной динамики: расчет связей, метод инкрементов.

20. Общие принципы метода Монте-Карло.

21. Общие принципы квантовых методов исследования.

22. Исследование механизмов протекания реакции: понятия о кинетических расчетах, планирование кинетических экспериментов.

23. Синтетический и ретросинтетический подходы к планированию органического синтеза.

24. Формально-логические и эмпирические методы планирования органического синтеза.

25. Построение деревьев синтеза биологически активных веществ с применением синтетического подхода.

26. Компьютерное планирование органического синтеза.

27. Принципы применения таблиц смежности и матриц связности.

28. Виды параметрической идентификации в зависимости от имеющихся представлений.

29. Решение обратной задачи химической кинетики (построение целевых функций).

30. Принципы решения прямой задачи химической кинетики.

Пользование различными техническими устройствами, кроме ЭВМ компьютерного класса и программным обеспечением, необходимым для решения поставленных задач, не допускается. При желании студента покинуть пределы аудитории во время зачета билет после его возвращения заменяется.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов задавать студенту в устной форме уточняющие вопросы в рамках задания, выданного студенту.

9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы

Учебным планом не предусмотрены.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Студенты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки.

Студенты, изучающие дисциплину, обеспечиваются электронными изданиями или доступом к ним, учебно-методическим комплексом по дисциплине, включая методические указания к выполнению практических работ, всех видов самостоятельной работы.

В учебный процесс рекомендуется внедрение субъект-субъектной педагогической технологии, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций студентов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины

Содержание рабочих программ дисциплин ежегодно обновляется протоколами заседаний кафедры по утвержденной «Положением о структуре, содержании и оформлении рабочих программ дисциплин по образовательным программам, соответствующим ФГОС ВО с учетом профессиональных стандартов» форме.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия
Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»
Дисциплина «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов»
Семестр 8

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО КОНТРОЛЬНОГО
ИСПЫТАНИЯ № 1**

1. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Расчет термодинамических величин методом молекулярной динамики.
2. Задание для проверки уровня «знать» – 0 или 1 балл:
Корреляция структура – фармакологическая активность (QSAR). Общие подходы, развитие теории.
3. Задание для проверки уровня «уметь» – 0 или 1 балл:
С помощью базы данных программы постройте двухцепочечный фрагмент ДНК со следующей последовательностью мононуклеотидов: аденин (А) – тимин (Т) – гуанин (Г) – цитозин (Ц) – А – Г – Ц – Т – А – А – Г – Ц – Т – Ц – А.

Критерии итоговой оценки за зачет:
«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;
«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

Составитель: проф. кафедры БХС

Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС

М.Г. Сульман