

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 13.07.2021 13:33:36
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной и
методической работе

_____ Б.В. Пекаревский
« ____ » _____ 2017 г.

Рабочая программа дисциплины
МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН
(Начало подготовки – 2017 год)

Специальность
18.05.01– Химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий

Специализация
№1 Химия и технология органических соединений азота

Квалификация выпускника
инженер

Форма обучения
очная

Факультет **инженерно-технологический**
Кафедра **химии и технологии органических соединений азота**

Б1.В.ДВ.01.01

Санкт-Петербург
2017

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчик		д.х.н., профессор, В.А. Островский

Рабочая программа дисциплины «Молекулярный дизайн» обсуждена на заседании кафедры Химии и технологии органических соединений азота.

03 февраля 2017, протокол № 16.

Заведующий кафедрой ХТОСА

Кирюшкин А.А.

Одобрено учебно-методической комиссией инженерно-технологического факультета
15 марта 2017 г, протокол №...7...

Председатель комиссии

Прояев В.В.

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП «Химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий»		Профессор В.В. Самонин
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	05
3. Объем дисциплины	06
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Занятия лекционного типа.....	07
4.3. Лабораторные занятия.....	08
4.4. Контроль самостоятельной работы.	09
4.5. Самостоятельная работа обучающихся.....	09
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	10
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	11
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	12
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	12
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	11
10.2. Программное обеспечение.....	11
10.3. Информационные справочные системы.....	12
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	12
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	12
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.	

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы специалитета обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОПК-2	Способностью профессионально использовать современное технологическое и аналитическое оборудование, способностью к проведению научного исследования и анализу полученных при его проведении результатов	<p>Знать: Принципы органического синтеза; химические и физико-химические методы анализа веществ; основы методологии органического синтеза и анализа химических веществ; физические основы современных методов инструментального анализа.</p> <p>Уметь: работать с научной, патентной и нормативной документацией; выбирать основное и вспомогательное технологическое оборудование по каталогам библиотеки СПбГТИ(ТУ) и в интернете; обрабатывать данные, полученные при синтезе органических соединений; обрабатывать полученные данные при работе на современном аналитическом оборудовании.</p> <p>Владеть: Техникой проведения эксперимента в соответствии с выбранной методикой; приёмами и методами органического синтеза; химическими и физико-химическими методами анализа химических веществ.</p>
ПК-10	Способностью изучать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследований	<p>Знать: Основные источники научно-технической информации о состоянии отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования; основные способы и методы извлечения информации об отечественном и зарубежном опыте по тематике исследований из различных источников.</p> <p>Уметь: Анализировать источники научно-технической информации; анализировать и обобщать содержащийся в источниках научный и технический материал, анализировать принадлежность химической реакции с участием органических соединений к тому или иному типу, а также представлять ее механизм.</p> <p>Владеть: Методами поиска научно-технической</p>

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
		информации; методиками анализа источников научно-технической информации о состоянии отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования; методами самостоятельного решения поставленных задач по поиску информации с учетом данных, получаемых из новейших источников научно-технической информации.
ПК-12	Способностью планировать и проводить необходимый эксперимент, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	<p>Знать: Химические и физико-химические методы анализа исходных промежуточных и конечных веществ, алгоритм обработки экспериментальных данных; алгоритмы и методологию эксперимента; способы и механизмы интерпретации полученных экспериментальных результатов.</p> <p>Уметь: Планировать химический эксперимент в соответствии с поставленными задачами и прогнозировать его возможные результаты; интерпретировать полученные в ходе работы результаты; оценивать уровень эффективности использованных экспериментальных методов.</p> <p>Владеть: Приёмами составления планов технологических или научно-исследовательских работ, нацеленных на получение определённого результата; навыками обработки и анализа результатов эксперимента, полученных при их проведении.</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Перечень дисциплин, необходимых для изучения дисциплины: органическая химия, физика, физическая химия.

Дисциплина относится к дисциплинам по выбору. Читается на 4 курсе в 7 семестре. Общая трудоёмкость 5 з.е.

Теоретическая часть дисциплины излагается в лекционном курсе. В основе преподавания дисциплины лежат передовые концепции супрамолекулярной химии. Преподают основы и принципы проектирования структуры молекул, удовлетворяющим заданным эксплуатационным параметрам. На конкретных примерах рассмотрены и анализируются признаки, самоорганизующихся молекул, способность этих уникальных объектов в программируемом режиме выполнять задачи современной медицины и техники. Самостоятельная работа предусматривает работу с учебно-методическим и информационным обеспечением дисциплины, выполнение домашних заданий. В рамках СРС студенты выполняют библиографический поиск, написание рефератов по отдельным разделам дисциплины.

Промежуточная аттестация осуществляется в форме зачета и экзамена.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего академических часов Очная форма обучения
Общая трудоёмкость дисциплины (зачётных единиц/академических часов)	180 (5 зач. ед)
Контактная работа с преподавателем	72
в том числе	
занятия лекционного типа.....	32
занятия семинарского типа	32
Семинары, практические занятия.....	
Лабораторные работы	32
Курсовое проектирование	
КСР	8
Другие виды контактной работы	
Самостоятельная работа	72
Форма текущего контроля	
Форма промежуточной аттестации	Зачёт, экзамен (36)

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции
			Лабораторные работы	КСР		
1.	Структура молекулы как объективный источник информации о биологической активности	4	16	2	10	ОПК-2
2.	Тотальный скрининг как исторически первый метод выявления соединений, обладающих биологической активностью. Основы комбинаторной химии.	6	16	-	10	ПК-10

3.	ABDD – Analogue-based Drug Discovery как метод прогноза спектра биологической активности. Компьютерный комплекс PASS	4	-	-	10	ПК-12
4.	Молекулярный докинг как метод прогноза биологической активности химических соединений.	6	-	4	10	ОПК-2
5.	Понятие о молекулярных дескрипторах. Прогноз биологической активности на основе дескрипторного анализа	4	-	-	12	ПК-10
6.	Линейность свободных энергий (ЛСЭ) как фундаментальная закономерность, определяющая вероятностный прогноз свойств химических соединений. Корреляционный анализ	4	-	-	12	ПК-12
7.	Количественные соотношения типа «структура – биологическая активность». Quantitative structure–activity relationship (QSAR).	4	-	2	8	ОПК-2
Итого:		32	32	8	72	

4.2. Занятия лекционного типа (32 ч.).

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<u>Структура молекулы как объективный источник информации о биологической активности.</u> Связь между молекулой вещества и биологической активности. Анализ правильного прогноза того или иного вида активности. Алгоритмы такого анализа. Понятие о константах заместителей - константы Гамета.	4	Слайд-презентация
2	<u>Тотальный скрининг как исторически первый метод выявления соединений, обладающих биологической активностью.</u> Основы комбинаторной химии. Первые синтетические лекарственные средства. Скрининг соединений. Методы автоматизированного синтеза, сложных соединений из заранее созданных молекулярных строительных блоков.	6	Слайд-презентация
3	<u>ABDD – Analogue-based Drug Discovery как метод прогноза спектра биологической активности.</u> Компьютерный комплекс PASS, основные принципы работы, используемые методы.	4	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
4	<u>Молекулярный докинг как метод прогноза биологической активности химических соединений.</u> Типы и оценка относительной эффективности взаимодействий молекулы с биологической мишенью. Виды взаимодействий между молекулой потенциального лекарственного средства и биологической мишенью.	6	Слайд-презентация
5	<u>Понятие о молекулярных дескрипторах.</u> Прогноз биологической активности на основе дескрипторного анализа. Функциональные группы.	4	Слайд-презентация
6	<u>Линейность свободных энергий (ЛСЭ) как фундаментальная закономерность, определяющая вероятностный прогноз свойств химических соединений.</u> Корреляционный анализ. Принцип линейности свободной энергии. Законов химической термодинамики. Принцип ЛСЭ как метод установления связи между природой и реакционной способностью молекул.	4	Слайд-презентация
7	<u>Количественные соотношения типа «структура – биологическая активность».</u> Quantitative structure–activity relationship (QSAR). Частный случай принципа ЛСЭ, является QSAR. Методологии прогноза. Понятия экспериментальных исследований.	4	Слайд-презентация
Итого:		32	

4.3. Лабораторные занятия (32 ч.).

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
1	Определение связи между молекулой вещества и её биологической активности. Понятие о константах заместителей - константы Гаммета.	8	
2	Исследование спектра биологической активности соединений заданного строения с помощью программно-аппаратного комплекса PASS	8	
3	Оптимизация геометрических параметров активных фармацевтических ингредиентов лекарственных средств с помощью метода молекулярной механики MM2.	8	

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
4	Соотношения типа «структура – биологическая активность». Работа в программе Quantitative structure–activity relationship (3D-QSAR).	8	
Итого:		32	

4.4. Контроль самостоятельной работы.

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
1	Построение молекулы обладающей биологической активностью, на основе раннее известных активных центров, оптимизация геометрических параметров с помощью молекулярной механики MM2.	2	Устный опрос
2	Прогноза биологической активности химических соединений с помощью компьютерных программ PASS и 3D-QSAR	4	Коллоквиум
3	Написание отчета на основе полученных данных	2	Письменный опрос
Итого		8	

4.5. Самостоятельная работа обучающихся (72 ч.).

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Виды рецепторов организма, взаимодействующих с АФИ Форма самоконтроля: деловая игра – блиц-диалог с преподавателем	10	Устный опрос Слайд-презентация
2	Программный комплекс PASS для выявления спектра биологической активности.	10	Устный опрос Слайд-презентация
3	Программный комплекс Chem3D для оптимизации геометрии АФИ Форма самоконтроля: сопоставление данных компьютерного анализа с результатами сборки и анализа механических моделей Стьюарта-	10	Устный опрос Слайд-презентация
4	Корреляционный анализ: уравнение Гамета Сопоставление результатов аналитического и графического анализов	10	Устный опрос Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
5	Методология ABDD на примере морфина и его производных Форма самоконтроля: На основе известного профиля активного центра фермента предложить формулу АФИ	12	Устный опрос Слайд-презентация
6	Анализ и прогноз биологической активности соединений на основе физико-химических закономерностей	12	Устный опрос Слайд-презентация
7	Основы молекулярного докинга. Корреляционный анализ: уравнение Брауна-Окамото.	8	Устный опрос Слайд-презентация
Итого:		72	

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>.

При чтении лекций используются материалы, представляемые в виде презентаций, с применением ресурса PowerPoint, включая анимационные режимы. Демонстрация - с помощью мультимедийного проектора, а также белой доски. В процессе обучения используются информационные материалы ведущих мировых производителей оборудования для производств малотоннажных химических продуктов.

В качестве учебных пособий используется кафедральный стенд, моделирующий стадию нитрования ароматических субстратов серно-азотной нитрующей смесью, а также различные типы емкостных реакторов, моделей перемешивающих устройств, средства автоматического контроля.

В процессе лабораторных работ используется оборудование ЦКП «Передовые методы диагностики в химии». Для демонстрации работы микрореактора используются ресурсы кафедры оптимизации химических и биотехнологических производств СПбГТИ(ТУ).

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Современное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить пороговый уровень освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета. К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Зачёт предусматривает проверку освоения предусмотренных элементов компетенций, и комплектуется двумя вопросами (заданиями) (для проверки знаний, умений и навыков). При сдаче зачёта, студент получает билет, состоящий из 2-х вопросов (заданий) из

перечня вопросов по дисциплине, время подготовки студента к устному ответу – до 30 минут.

Оценка «зачтено» (пороговый уровень) ставится студенту, обнаружившему понимание учебного материала в объеме, необходимом для предстоящей работы по профессии, справляющемуся с выполнением заданий, предусмотренных программой практики, при наличии в содержании отчета и его оформлении небольших недочётов или недостатков, затруднениях при ответах на вопросы.

Вторая промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена. К сдаче экзамена допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Обобщённая оценка по итогам экзамена определяется с учётом характера и содержания ответов:

Оценка «отлично» ставится, если содержание ответов на вопросы свидетельствует об уверенных знаниях студента и о его умении качественно решать профессиональные задачи, соответствующие данному этапу подготовки.

Оценка «хорошо» ставится, если содержание ответов свидетельствует о достаточных знаниях студента и о его умении решать профессиональные задачи, но при наличии в содержании отчета и его оформлении небольших недочётов или недостатков.

Оценки «удовлетворительно» заслуживает студент, справляющийся с выполнением заданий, предусмотренных программой обучения, при наличии в ответах недочётов или недостатков, затруднениях при ответах на вопросы.

Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студенту при наличии в ответах существенных недочётов или недостатков, отсутствии ответов на вопросы, неконкретного характера выводов и предложений.

Пример варианта билетов на зачёте:

Вариант № 1

1. Прогноз спектра биологической активности с применением базы данных PASS.

Пример варианта билетов на экзамене:

Вариант № 1

1. Прогноз спектра биологической активности с применением базы данных PASS.
2. Алгоритмы поиска библиографии при разработке формы молекулы.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) основная литература:

Трифонов, Р.Е. Моделирование структуры и свойств молекул методами молекулярной механики и молекулярной динамики: Учебное пособие/ Р.Е.Трифонов, В.А.Островский. СПбГТИ(ТУ). Каф. хим. технологии орг.соед. азота. – СПб., 2011. – 52 с. (ЭБ)

Няникова, Г.Г. Методы определения активности антибиотиков: Методические указания к лабораторной работе / Г.Г. Няникова, СПбГТИ(ТУ), СПб.-2014.-39 с. (ЭБ).

б) дополнительная литература:

Машковский, М.Д. Лекарственные средства. Пособие для врачей. М.Д. Машковский. М.: Новая волна. 2008. - 1206 с.

Радченко, Е.В. Локальные молекулярные характеристики в анализе количественной связи «структура-свойство» / В.А. Палюлин, Н.С. Зефирова // Российский химический журнал - 2006, т.50, № 2, с. 76-86.

Филимонов, Д.А. Прогноз спектра биологической активности органических соединений / Д.А. Филимонов, В.В. Поройков // Российский химический журнал . - 2006.- т. 50, № 2, с. 66-76.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать интернет-ресурсы:

проводить поиск в системах: Scirus.com. SciFinder, Reaxys.

Государственная публичная научно-техническая библиотека. <http://www.gpntb.ru/>;

Учебный план РПД и учебно-методический материал; <http://media.technolog.edu.ru>

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

Федеральный портал «Российское образование» <http://www.edu.ru/>

Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» <http://school-collection.edu.ru/>

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>. ООО «Издательство «Лань».

«Научно-электронная библиотека eLibrary.ru». <http://elibrary.ru>. Государственная публичная научно-техническая библиотека. <http://www.gpntb.ru/>;

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Дисциплина обеспечена необходимой литературой и учебными пособиями. При чтении лекций используются презентации, слайды рисунки и схемы, представляемые с помощью мультимедийного проектора.

Лекционные, практические и лабораторные занятия проводятся в специализированных аудиториях и лабораториях. Лекционная аудитория оснащена мультимедийной системой с комплектом презентаций и видеофильмов.

Практические занятия проводятся в специализированной аудитории, снабженной персональными компьютерами, программным обеспечением для выполнения обработки экспериментальных данных.

Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к лабораторным и практическим занятиям;
- работу с интернет-источниками;
- посещение научных семинаров и конференций, проводимых в Санкт-Петербурге;
- подготовку к сдаче зачётов и экзаменов.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал,

пройденный на семинарских занятиях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в «Рабочей программе». По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в «Рабочей программе» дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Все виды занятий по дисциплине преподаватели должны проводить в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПб ГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Практические и семинарские занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПб ГТИ 040-2002. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования. Утв. ректором 17.05.2002;

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению. Утв. Ректором 11.12.2009;

Планирование времени, необходимого для изучения данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является: плановость в организации учебной работы; серьезное отношение к изучению материала; постоянный самоконтроль.

На занятия студентов должен приходиться, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

С целью более эффективного усвоения студентами материала данной дисциплины рекомендуется при проведении занятий использовать мультимедийные ресурсы, а также ресурсы сети интернет.

Устный опрос проводится с целью определения качества усвоения лекционного материала.

На контрольных мероприятиях студентам предлагается ответить на 2 вопроса по материалам учебной дисциплины. Оценка проставляется в зачетную книжку.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций
- взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты
- информационные справочные системы Scirus.com, SciFinder, Reaxys

Для расширения знаний по теме обучения рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как, www.yandex.ru, www.google.ru и других, и использовать материалы Интернет-ресурсов профильных организаций, рекомендованных преподавателем.

Возможна сдача электронного варианта отчетов, рефератов, литературных обзоров и др. по электронной почте, обмен информацией по социальным сетям.

10.2. Программное обеспечение.

Пакеты прикладных программ стандартного набора (Microsoft Office).

(Microsoft Excel; Microsoft Word; Microsoft PowerPoint).
проводить поиск в системах: Scirus.com. SciFinder, Reaxys.

10.3. Информационные справочные системы.

- Электронно-библиотечные системы, предлагаемые библиотекой СПбГТИ(ТУ).
- Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»,
- «Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
- Федеральный портал «Российское образование» <http://www.edu.ru/>
- Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов»
<http://school-collection.edu.ru/>
- «Лань» <https://e.lanbook.com/books/>. ООО «Издательство «Лань».
- «Научно-электронная библиотека eLibrary.ru». <http://elibrary.ru>. Наименование организации – ООО РУНЭБ.

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

- Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники на 50 посадочных мест.
 - Для проведения лабораторных занятий используется синтетический практикум, рассчитанный на 30 рабочих мест, оборудованный для проведения химических синтезов.
- Кафедра оснащена необходимым научно-исследовательским оборудованием, измерительными и вычислительными комплексами и другим материально-техническим обеспечением, необходимым для полноценного прохождения учебного процесса.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014 г.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине «Молекулярный дизайн»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Компетенции		
Индекс	Формулировка	Этап формирования
ОПК-2	Способность профессионально использовать современное технологическое и аналитическое оборудование, способностью к проведению научного исследования и анализу полученных при его проведении результатов	промежуточный
ПК-10	Способность изучать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследований	промежуточный
ПК-12	Способность планировать и проводить необходимый эксперимент, корректно обрабатывать и анализировать полученные результаты	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания.

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 1	Знает понятия биологической активности Умеет по структуре молекулы определять свойства биологической активности Владеет основами разработки схем синтеза	Правильные ответы на вопросы № 1-3 по форме промежуточного контроля	ОПК-2
Освоение раздела № 2	Знает методы выявления соединений, обладающих биологической активностью. Умеет Владеет основами комбинаторной химии.	Правильные ответы на вопросы № 4-7 по форме промежуточного контроля	ПК-10

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 3	Знает основные метод прогноза спектра биологической активности. Умеет Владает комплексом компьютерного прогноза PASS	Правильные ответы на вопросы № 8-11 по форме промежуточного контроля	ПК-12
Освоение раздела № 4	Знает метод молекулярного докинга. Умеет оценивать относительную эффективность взаимодействий молекулы с биологической мишенью Владает оценкой значимости молекулы на фам. рынке	Правильные ответы на вопросы № 12-15 по форме текущего контроля	ОПК-2
Освоение раздела № 5	Знает о молекулярных дескрипторах Умеет на основе дескрипторного анализа делать прогноз биологической активности Владает техникой определения необходимых заместителей в молекуле	Правильные ответы на вопросы № 16-20 по форме промежуточного контроля	ПК-10
Освоение раздела № 6	Знает знаниями о линейности свободных энергий (ЛСЭ) Умет определять вероятностный прогноз свойств химических соединений. Владает фундаментальными закономерностями корреляционного анализа	Правильные ответы на вопросы № 21-25 по форме промежуточного контроля	ПК-12
Освоение раздела № 7	Знает количественные соотношения типа «структура – биологическая активность». Умеет подбирать молекулу к биологической мишени Владает построением взаимодействий «ключ-замок»	Правильные ответы на вопросы № 26-30 по форме промежуточного контроля	ОПК-2

3. Контрольные вопросы по дисциплине к зачёту и экзамену

1. Ретросинтетический анализ. Цель, методология, границы применимости;
2. Линейные схемы синтеза. Преимущества и ограничения.
3. Конвергентные схемы синтеза. Преимущества и ограничения.
4. Жизненный цикл ВИЧ и молекулярные структуры ингибиторов вирусных ферментов ВИЧ.

5. Схема синтеза субстанции препарата «Азидотимидин».
6. Схема синтеза субстанции препарата «Виагра».
7. Защитные группы в синтезе органических азотсодержащих соединений.
8. Планирование схем синтеза «От исходных реагентов».
9. Защитные группы в синтезе органических азотсодержащих соединений.
10. Схема синтеза препарата «Зиртек».
11. Алгоритмы поиска библиографии при разработке схем и методов синтеза органических соединений азота.
12. Стереохимический контроль в синтезе оптически активных органических соединений азота.
13. Приведена контурная схема получения витамина В_с на каждой стадии синтеза; Укажите реагенты, которые необходимы для проведения
14. Перегруппировки Курциуса, Шмидта, Лоссеня. Общность и различие в механизмах этих процессов.
15. Межфазный катализ в химии органических соединений азота.
16. Домино-реакции в химии органических соединений азота.
17. Схем синтеза субстанции препарата «Неовир».
18. Аналитическое сопровождение многостадийных синтезов органических соединений азота.
19. Кросс-сочетание арилгалогенидов и терминальных алкинов по Соногашира
20. Новейшие методы селективного построения связей С – С в химии органических соединений азота. Реакция Хека.
21. Новейшие методы селективного построения связей С – С в химии органических соединений азота. Реакция Сузуки.
22. Новейшие методы селективного построения связей С – С в химии органических соединений азота. Реакция Негиши.
23. Новейшие методы селективного построения связей С – С в химии органических соединений азота. Реакция Соногашира.
24. Молекулярные перегруппировки в химии органических соединений азота. Реакция Шмидта.
25. Молекулярные перегруппировки в химии органических соединений азота. Реакция Курциуса.
26. Молекулярные перегруппировки в химии органических соединений азота. Реакция Лоссеня.
27. На основании ретросинтетического анализа структурной формулы разработать рациональную схему синтеза субстанции антибиотика «Цефазолин»;
28. Общие подходы к синтезу энантиомерно чистых соединений. Привести примеры
29. Прогноз спектра биологической активности с применением базы данных PASS.
30. Разработка схемы многостадийного синтеза сложных молекул с применением базы структурного поиска Reaxys.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СТП СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.