

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 19.05.2022 10:48:06  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



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

**УТВЕРЖДАЮ**

Врио проректора по учебной  
и методической работе

\_\_\_\_\_ Б.В.Пекаревский

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2021 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**ВВЕДЕНИЕ В ХЕМОИНФОРМАТИКУ**  
Направление подготовки

**18.03.01 Химическая технология**

Направленность программы бакалавриата

**Химическая технология синтетических биологически активных веществ, химико-фармацевтических препаратов и косметических средств**

Квалификация

**Бакалавр**

Форма обучения

**Заочная**

**Факультет химической и биотехнологии**

**Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ**

Санкт-Петербург

2021

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Заведующий кафедрой		Профессор Крутиков В.И.

Рабочая программа дисциплины «Введение в хемоинформатику» обсуждена на заседании кафедры химии и технологии синтетических биологически активных веществ

протокол от 10 марта 2021 № 8

Заведующий кафедрой

В.И. Крутиков

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии  
протокол от 18 марта 2021 № 8

Председатель

М.В. Рутто

## СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химическая технология»		М.В. Рутто
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник учебно-методического управления		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.....	06
3. Объем дисциплины .....	06
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Занятия лекционного типа.....	07
4.3. Занятия семинарского типа.....	08
4.3.1. Семинары, практические занятия .....	08
4.3.2. Лабораторные занятия.....	08
4.4. Самостоятельная работа.....	08
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	09
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	09
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	09
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	09
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	09
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	10
10.2. Программное обеспечение.....	10
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	10
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	10
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья .....	10

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 бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p><b>ПК-4</b> Планирование и проведение физических и химических экспериментов, прогнозирование и обработка полученных результатов, оценка погрешности, выдвижение гипотезы, применение методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования</p>	<p><b>ПК-4.2</b> Прогнозирование биологической активности веществ на основании результатов физических и химических методов исследований, математического моделирования</p>	<p><b>Знать:</b> Физические, химические и математические методы прогнозирования биологической активности веществ (ЗН-1) <b>Уметь:</b> предсказывать биологически активные свойства вещества (У-1) <b>Владеть:</b> Основами математического моделирования строения вещества с заданными биологически активными свойствами свойства (Н-1)</p>
	<p><b>ПК-4.3</b> Прогнозирование биологической активности веществ на основании результатов физических и химических методов исследований, математического моделирования</p>	<p><b>Знать:</b> влияние структуры вещества на его биологические свойства (ЗН-2) <b>Уметь:</b> Классифицировать потенциальные БАВ фармакофоров (У-2) <b>Владеть:</b> основными методами предсказания вида и уровня биологической активности (Н-2)</p>

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Введение в хемоинформатику» относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.ДВ.01.01) и является дисциплиной по выбору, изучается на 4 курсе в 8 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Физическая химия», «Процессы и аппараты химической технологии», «Введение в химическую технологию и основы научных исследований» и «Химические основы физиологии растений и животных». Полученные в процессе изучения дисциплины знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы

## 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	<b>5/180</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>14</b>
занятия лекционного типа	8
занятия семинарского типа, в т.ч.	-
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	6(6)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	-
Курсовая работа(КР)	-
КСР	-
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>157</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	3Кр
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП , зачет, экзамен)	Зачет/9

#### 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	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1	Введение	0,5	-	-	-	ПК-4	ПК-4.2
2	История развития исследований по проблеме связи "структура - биологическая активность". Биотрансформация веществ в организме	0,5	-	-	15	ПК-4	ПК-4.2
3	Моделирование связи "структура - активность"	0,5	-	-	15	ПК-4	ПК-4.2
4	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Ганча	0,5	-	-	15	ПК-4	ПК-4.2
5	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Фри-Вильсона	0,5	1	-	15	ПК-4	ПК-4.2
6	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Кубиньи	0,5	-	-	15	ПК-4	ПК-4.2
7	Параметр липофильности, методы определения и расчета	1	1	-	15	ПК-4	ПК-4.2
8	Химические и биомедицинские базы данных: использование в процессе создания лекарственных средств	1	1	-	15	ПК-4	ПК-4.2
9	Современные методы прогнозирования биологической активности органических соединений	1	2	-	15	ПК-4	ПК-4.2
10	Программа PASS. Компьютерная система IBIAC	1	-	-	15	ПК-4	ПК-4.2
11	Молекулярный докинг	1	1	-	22	ПК-4	ПК-4.2

##### 4.2. Занятия лекционного типа

№ раздела дисцип	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Рациональный дизайн биологически активных веществ История развития исследований по проблеме связи "структура - биологическая активность"	0,5	ЛВ
2	Биотрансформация веществ в организме	0,5	ЛВ, РД
3	Системный физико-химический подход к конструированию биологически активных веществ, его основные этапы	0,5	ЛВ, Д
4	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Ганча	0,5	ЛВ, Д
5	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Фри-Вильсона	0,5	ЛПК, РД
6	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Кубиньи	0,5	ЛВ, Д
7	Параметр липофильности, методы определения и расчета	1	ЛВ, Д
8	Химические и биомедицинские базы данных: использование в процессе создания лекарственных средств	1	ЛПК, Д
9	Современные методы прогнозирования биологической активности органических соединений	1	ЛВ, Д
10	Программа PASS. Компьютерная система IBIAC	1	ЛПК, Д
11	Молекулярный докинг	1	ЛВ, Д

### 4.3. Занятия семинарского типа

#### 4.3.1. Семинары, практические занятия

№ раздела дисциплин ы	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инноваци онная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку	
5	<u>Синтез адипиновой кислоты.</u> Отработка методики получения, определение физико-химических свойств			МГ
7	<u>Синтез диалкил- и триалкилфосфитов.</u> Отработка методики получения, определение физико-химических свойств			МГ
8	<u>Синтез гидрохлорида трис(2-хлорэтил)амин.</u> Отработка методики получения, определение физико-химических свойств			МГ
9	<u>Синтез бензотрифторида.</u> Отработка методики получения, определение физико-химических свойств			МГ
11	Отработка методики определения физико-химических свойств потенциальных биологически активных соединений по теме исследования			МГ

#### 4.3.2. Лабораторные работы

Лабораторные работы по данной дисциплине учебным планом не предусмотрены.

#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- умение пользоваться обширным справочным аппаратом;
- подготовку к сдаче коллоквиумов;
- подготовку к выполнению лабораторных работ;
- подготовку к сдаче зачета.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля



№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	История развития исследований по проблеме связи "структура - биологическая активность". Биотрансформация веществ в организме	15	Устный опрос
3	Моделирование связи "структура - активность"	15	Устный опрос
4	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Ганча	15	Устный опрос
5	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Фри-Вильсона	15	Устный опрос
6	Оптимизация свойств в ряду родственных соединений. Метод Кубиньи	15	Устный опрос
7	Параметр липофильности, методы определения и расчета	15	Устный опрос
8	Химические и биомедицинские базы данных: использование в процессе создания лекарственных средств	15	Устный опрос
9	Современные методы прогнозирования биологической активности органических соединений	15	Устный опрос
10	Программа PASS. Компьютерная система IBIAC	15	Устный опрос
11	Молекулярный докинг	22	Устный опрос

### **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: <https://media.technolog.edu.ru>

### **6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень освоения предусмотренных элементов компетенций.

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

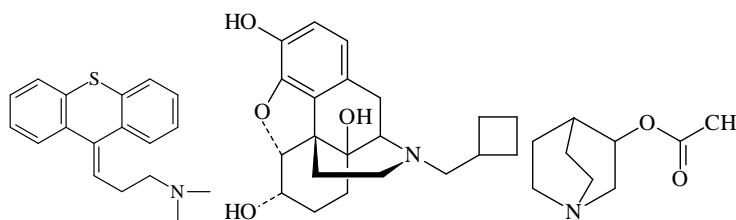
Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями)

При сдаче зачета, студент получает три вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта вопросов на зачете:

#### Вариант № 1

1. Современные подходы к целенаправленному синтезу биологически активных веществ.
2. Количественная мера биоактивности. Способ определения меры биоактивности.
3. Рассмотрите следующие структуры. Определите вероятный вид их биологической активности. Ответ обоснуйте описанием присутствующих в молекулах характерных фармакофоров:



Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «зачтено».

### 7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

#### а) печатные издания:

1. Граник, В.Г. Лекарства: фармакологический, биохимический и химический аспекты / В. Г. Граник. Москва: Вузовская книга, 2006. - 407 с. ISBN 5-9502-0124-8.
2. Основы курсового и дипломного проектирования: учебное пособие / Г. П. Шапошников [и др.]; Ивановский государственный химико-технологический университет; Иваново, 2010. – 200 с. ISBN 978-5-9616-0361-3.
3. Солдатенков, А.Т. Пестициды и регуляторы роста: прикладная органическая химия / А.Т. Солдатенков, Н.М. Колядина, А. Ле Туан – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 223 с. ISBN 978-5-9963-0202-4.
4. Основы проектирования химических производств: учеб. Для вузов / под ред. А. И. Михайличенко. – Москва: ИКЦ «Академкнига», 2006.– 332 с. ISBN 5-94628-131-3
5. Краткий справочник физико-химических величин. Изд.одиннадцатое, испр. и дополн./ под ред. А.А. Равделя и А.М.Пономаревой – Москва: ООО «ТИД «Аз-book», 2009. – 240 с. ISBN 978-5-905034-03-0.
6. Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учебное пособие для вузов по спец. "Основные процессы химических производств и химическая кибернетика" / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – Москва: Академкнига, 2006. - 416 с. ISBN: 5-94628-268-9

7. Основы токсикологии: учебное пособие для вузов / П. П. Кукин, Н. Л. Пономарев, К. Р. Таранцева [и др.] - Москва : Высшая школа, 2008. - 279 с. ISBN 978-5-06-005717-1.

8. Фаддеев, М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента: учебное пособие / М. А. Фаддеев. – Санкт-Петербург, Москва, Краснодар: Лань, 2008. - 117 с. ISBN 978-5-81114-0817-7.

#### **б) электронные учебные издания:**

1. Крутиков, В.И. Синтез, свойства и биологическая активность ароматических галогенкетонов: учебное пособие / В.И. Крутиков, В.В. Крутикова; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2014.- 48 с. СПбГТИ. Электронная библиотека. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

2. Крутиков, В.И. Особенности физиологического действия фосфорорганических соединений и их детоксикация: учебное пособие / В.И. Крутиков, В.В. Крутикова; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2008.- 80 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

3. Еркин, А.В. Способы синтеза и химической модификации некоторых реакционноспособных пиримидинов: учебное пособие / А.В. Еркин; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2014.- 17 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

4. Масленников, И.Г. Механизмы реакций органического синтеза (гетеролитические реакции): учебное пособие/ И.Г. Масленников; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2013. – 98 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

5. Масленников, И.Г. Основы проектирования производств органического синтеза: учебное пособие/ И.Г. Масленников, В.И. Крутиков, К.И. Еремин; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2015. – 132 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

6. Масленников, И.Г. Химия и технология пестицидов: учебное пособие/ И.Г. Масленников; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2016. – 123 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

## **8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.**

- учебный план, РПД и учебно-методические материалы:

<http://media.technolog.edu.ru>

- **Электронная библиотека СПбГТИ(ТУ) (на базе ЭБС «БиблиоТех»)**

Принадлежность – собственная СПбГТИ(ТУ).

Договор на передачу права (простой неисключительной лицензии) на использования результата интеллектуальной деятельности ООО «БиблиоТех»

ГК№0372100046511000114\_135922 от 30.08.2011

Адрес сайта – <http://bibl.lti-gti.ru/>

Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как [www.yandex.ru](http://www.yandex.ru), [www.google.ru](http://www.google.ru), [www.rambler.ru](http://www.rambler.ru), [www.yahoo.ru](http://www.yahoo.ru) и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

С компьютеров института открыт доступ к:

[www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru) - eLIBRARY - научная электронная библиотека периодических изданий;

<http://e.lanbook.com> - Электронно-библиотечная система издательства «Лань», коллекции «Химия» (книги издательств «Лань», «Бином», «НОТ»), «Нанотехнологии» (книги издательства «Бином. Лаборатория знаний»);

[www.consultant.ru](http://www.consultant.ru) - КонсультантПлюс - база законодательных документов по РФ и Санкт-Петербургу;

[www.scopus.com](http://www.scopus.com) - База данных рефератов и цитирования Scopus издательства Elsevier;

<http://webofknowledge.com> - Универсальная реферативная база данных научных публикаций Web of Science компании Thomson Reuters;

<http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>, <http://iopscience.iop.org/page/subjects> - Издательство ИОР (Великобритания);

[www.oxfordjournals.org](http://www.oxfordjournals.org) - Архив научных журналов издательства Oxford University Press;

<http://www.sciencemag.org/> - Полнотекстовый доступ к журналу Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS));

<http://www.nature.com> - Доступ к журналу Nature (Nature Publishing Group);

<http://pubs.acs.org> - Доступ к коллекции журналов Core + издательства American Chemical Society;

<http://journals.cambridge.org> - Полнотекстовый доступ к коллекции журналов Cambridge University Press.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Все виды занятий по дисциплине ««Химия пестицидов»» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

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

Планирование времени, необходимого на изучение 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 студент должен приходиться, имея знания по уже изученному материалу.

## **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 ЭИОС.

### **10.2. Программное обеспечение**

MicrosoftOffice (MicrosoftExcel);

### **10.3. Базы данных и информационные справочные системы.**

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»

## **11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.**

Для проведения занятий в интерактивной форме, чтения лекций в виде презентаций, демонстрации видео материалов используется мультимедийная техника и компьютерный класс с персональными компьютерами.

Для проведения лабораторных и практических занятий используется следующее оборудование: дистилляторы, весы, центрифуга напольная, сушильный шкаф, морозильная камера, компьютер, ЯМР спектрометр, ИК спектрометр, дериватограф, УФ кабинет, рефрактометр, насос вакуумный, сушильный шкаф, муфельные печи, весы аналитические, спектрофотометр, прибор для определения температуры плавления, иономер, УФ-кабинет, рефрактометр, микроскоп. Лабораторная посуда: биологический. Стекло колбы, мерные цилиндры, водоструйный насос, холодильник, чашки Петри, колба Бунзена, воронка Бюхнера, ртутный термометр.

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

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебный 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.

**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по  
дисциплине «Введение в хемоинформатику»**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-4	Планирование и проведение физических и химических экспериментов, прогнозирование и обработка полученных результатов, оценка погрешности, выдвижение гипотезы, применение методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	промежуточный

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

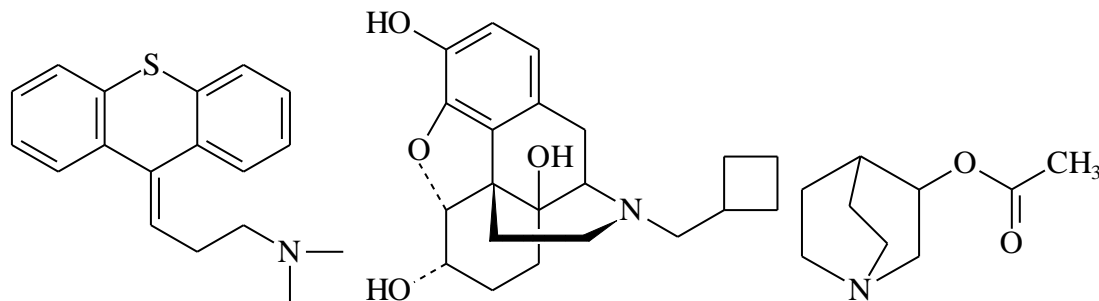
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«не зачтено» (пороговый)	«зачтено» (пороговый)	«зачтено» (высокий)
ПК-4.3 Прогнозирование биологической активности веществ на основании результатов физических и химических методов исследований, теоретического и экспериментального исследования	Приводит примеры влияния строения вещества на его свойства	Правильные ответы на вопросы №1-12 к зачету. Определение вероятного вида биологической активности соединений I- XII	Не приводит примеры влияния строения вещества на его свойства	Приводит примеры влияния строения вещества на его свойства, но с наводящими вопросами	Приводит примеры влияния строения вещества на его свойства, сравнивает и анализирует
	Поясняет классификацию химических реакции по типу реагента	Правильные ответы на вопросы №1-12 к зачету. Определение вероятного вида биологической активности соединений I- XII	Не поясняет классификацию химических реакции по типу реагента	Поясняет классификацию химических реакции по типу реагента	Сопоставляет и делает выводы по классификации химических реакции по типу реагента
	Выполняет задания по основным методам контроля за ходом протекания химического превращения	Правильные ответы на вопросы №1-12 к зачету. Определение вероятного вида биологической активности соединений I- XII	Не выполняет задания по основным методам контроля за ходом протекания химического превращения	Имеет навыки выполнения заданий по основным методам контроля за ходом протекания химического превращения	Демонстрирует уверенные навыки выполнения заданий по основным методам контроля за ходом протекания химического превращения

### 3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

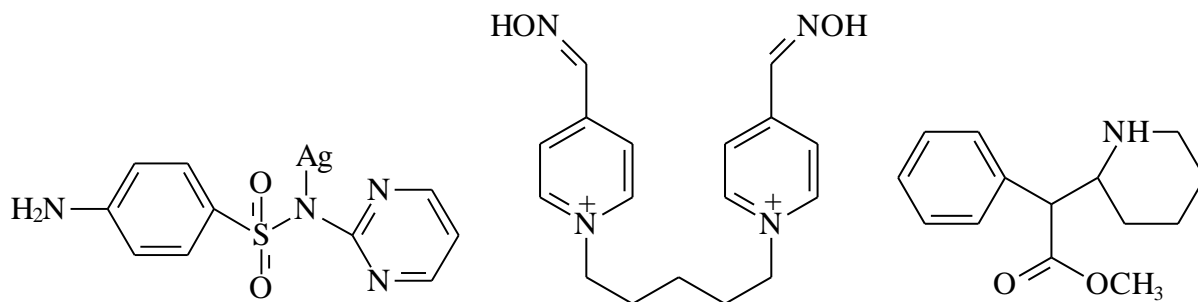
**Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-4:**

1. Современные подходы к целенаправленному синтезу биологически активных веществ.
2. Пути создания принципиально новых лекарственных препаратов
3. Причины сокращения числа новых лекарственных веществ
4. Что такое виртуальный скрининг?
5. Организация рационального дизайна биологически активных соединений.
6. Количественная мера биоактивности. Способ определения меры биоактивности.
7. Транспорт веществ от места введения до биомишени. Фазы биохимической трансформации веществ.
8. Экспериментальные и теоретические методы определения параметра липофильности органических веществ
9. Строение биологических мембран
10. Метод Ганча по оптимизации свойств в ряду родственных соединений
11. Метод Фри-Вильсона по оптимизации свойств в ряду родственных соединений
12. В чем отличия методов Ганча и Кубиньи?

Рассмотрите следующие структуры. Определите вероятный вид их биологической активности. Ответ обоснуйте описанием присутствующих в молекулах характерных фармакофоров.



IIII

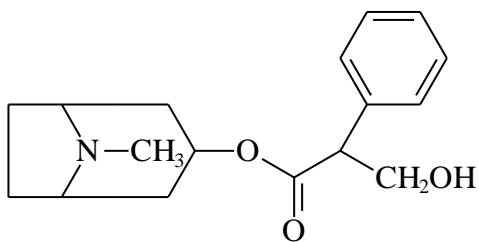


IV

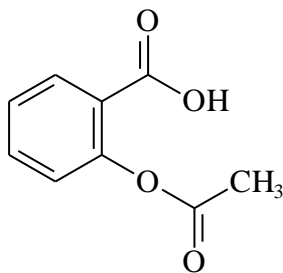
V

VI

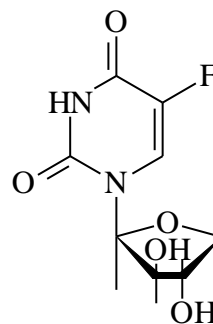




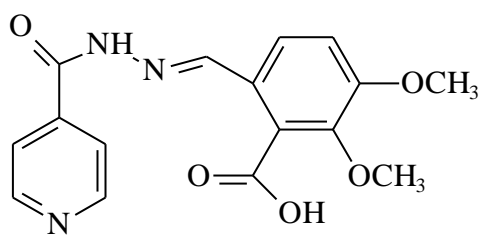
VII



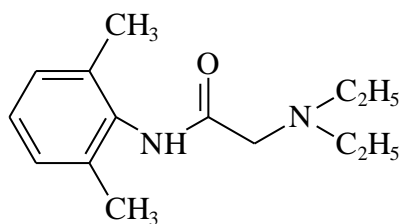
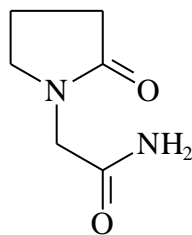
VIII



IX



XXIXII

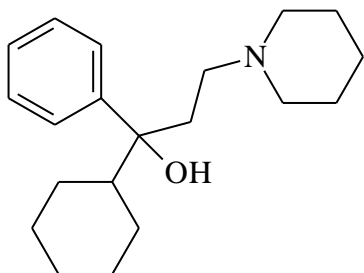


К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

#### 4. Примеры контрольных работ

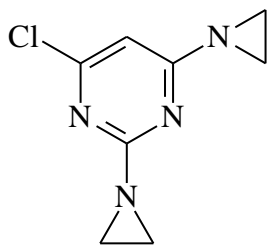
##### Работа 1

Определите вероятный вид их биологической активности. Ответ обоснуйте описанием присутствующих в молекулах характерных фармакофоров



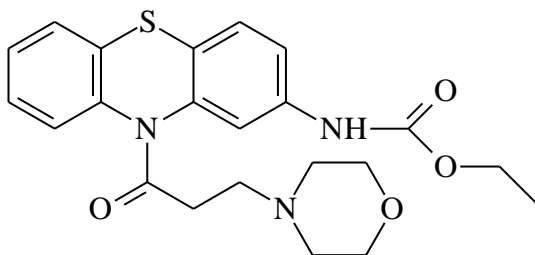
##### Работа 2

Определите вероятный вид их биологической активности. Ответ обоснуйте описанием присутствующих в молекулах характерных фармакофоров



### Работа 3

Определите вероятный вид их биологической активности. Ответ обоснуйте описанием присутствующих в молекулах характерных фармакофоров



### 5. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций

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

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета. Шкала оценивания на зачёте – «зачёт», «незачет». При этом «зачёт» соотносится с пороговым уровнем сформированности компетенции.