

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет»
Министерства здравоохранения Российской Федерации

Фармацевтический факультет

Кафедра органической химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Б1.В.16 ОСНОВЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В
ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ**

Направление подготовки: 04.03.01 Химия

Профиль подготовки: Синтез и анализ органических соединений

Формы обучения: очная

Квалификация (степень) выпускника: Бакалавр

Год набора: 2021

Срок получения образования: очная форма обучения – 4 года

Объем: в зачетных единицах: 3 з.е.
в академических часах: 108 ак.ч.

Разработчики:

Кандидат химических наук, доцент Чернов Н. М.

Рабочая программа дисциплины (модуля) составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки России от 17.07.2017 № 671

Согласование и утверждение

№	Подразделение или коллегиальный орган	Ответственное лицо	ФИО	Виза	Дата, протокол (при наличии)
1	Кафедра органической химии	Заведующий кафедрой, руководитель подразделения, реализующего ОП	Яковлев Игорь Павлович	Рассмотрено	16.06.2021, № 12
2	Методическая комиссия фармацевтического факультета	Председатель методической комиссии	Жохова Елена Владимировна	Согласовано	30.06.2021, № 10
3	Кафедра органической химии	Ответственный за образовательную программу	Ксенофонтова Галина Владимировна	Согласовано	30.06.2021

Согласование и утверждение образовательной программы

№	Подразделение или коллегиальный орган	Ответственное лицо	ФИО	Виза	Дата, протокол (при наличии)
1	фармацевтический факультет	Декан, руководитель подразделения	Ладутько Юлия Михайловна	Согласовано	30.06.2021, № 11

1. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Компетенция(и), индикатор(ы) и результаты обучения

ПК-ПЗ Способен планировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации

ПК-ПЗ.3 Способен осуществлять направленный синтез органических соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи

Знать:

ПК-ПЗ.3/Зн3 Знать принципы построения моделей в хемоинформатике

ПК-ПЗ.3/Зн4 Знать основные программные продукты для молекулярного моделирования

ПК-ПЗ.3/Зн5 Знать основные методы молекулярного моделирования

Уметь:

ПК-ПЗ.3/Ум2 Уметь выполнять прогнозирование свойств органических соединений

ПК-ПЗ.3/Ум3 Уметь выполнять виртуальный скрининг биологической активности

ПК-ПЗ.3/Ум4 Уметь решать типовые задачи молекулярного моделирования

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина (модуль) Б1.В.16 «Основы компьютерного моделирования в органической химии» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 8.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.14 Методы органического синтеза;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.В.14 Методы органического синтеза;

Б3.01(Д) Подготовка к защите и защита выпускной квалификационной работы;

Б2.В.01.02(Пд) производственная практика, преддипломная практика;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

3. Объем дисциплины и виды учебной работы

Очная форма обучения

Период	доемкость сы)	доемкость ЭТ)	ая работа всего)	ие занятия сы)	т (часы)	ии в период обучения (часы)	ьная работа а (часы)	ая аттестация сы)
--------	------------------	------------------	---------------------	-------------------	----------	--------------------------------	-------------------------	----------------------

обучения	Общая гру (час)	Общая гру (ЗЕ)	Контактн. (часы,	Практичес (ча	Лекции	Консультац теоретического	Самостоятел. студент	Промежуточн (ча
Восьмой семестр	108	3	62	28	14	20	40	Зачет (6)
Всего	108	3	62	28	14	20	40	6

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы, темы дисциплины и виды занятий

Очная форма обучения

Наименование раздела, темы	Всего	Лекции	Практические занятия	Самостоятельная работа студента	Консультации в период теоретического обучения	Планируемые результаты обучения, соотнесенные с результатами освоения программы
Раздел 1. Основы хемоинформатики.	36	6	12	12	6	ПК-ПЗ.3
Тема 1.1. Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования.	12	2	4	4	2	
Тема 1.2. Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений.	12	2	4	4	2	
Тема 1.3. Молекулярное подобие и виртуальный скрининг.	12	2	4	4	2	
Раздел 2. Основы молекулярного моделирования.	66	8	16	28	14	ПК-ПЗ.3
Тема 2.1. Молекулярное моделирование. Термины и понятия.	12	2	4	4	2	
Тема 2.2. Квантовохимические методы молекулярного моделирования.	12	2	4	4	2	
Тема 2.3. Типовые задачи молекулярного моделирования.	12	2	4	4	2	
Тема 2.4. Молекулярный докинг.	30	2	4	16	8	
Итого	102	14	28	40	20	

4.2. Содержание разделов, тем дисциплин и формы текущего контроля

Раздел 1. Основы хемоинформатики.

Тема 1.1. Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования.

Представление химической информации в компьютерной среде. Химические базы данных, организация структурного поиска. Статистические методы моделирования. Обучение работы с химическими редакторами и основными базами химических данных. Перевод химической информации из графической формы в текстовую и наоборот.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство
Тест

Тема 1.2. Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений.

Прогнозирование свойств органических соединений. Поиск количественных соотношений структура-активность (QSAR). Использование баз данных и статистических моделей для прогнозирования свойств соединений на примере предсказания спектров ЯМР и виртуального скрининга биологической активности. Решение индивидуальных задач.

Использование статистических моделей для нахождения количественной взаимосвязи структура-активность (QSAR). Решение индивидуальной задачи.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство
Тест
Индивидуальные задания

Тема 1.3. Молекулярное подобие и виртуальный скрининг.

Использование статистических моделей для нахождения количественной взаимосвязи структура-активность (QSAR). Решение индивидуальной задачи.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство
Тест
Индивидуальные задания

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования.

Тема 2.1. Молекулярное моделирование. Термины и понятия.

Термины и понятия молекулярного моделирования (ММ). Классификация методов ММ. Программные продукты для ММ. Молекулярная динамика, принцип и области применения, конформационный анализ. Анализ и обсуждение методов молекулярного моделирования. Анализ принципов решения задач по оптимизации геометрии молекул и расчету их зарядовых характеристик. Решение индивидуальных задач.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство
Индивидуальные задания

Тема 2.2. Квантовохимические методы молекулярного моделирования.

Квантовохимические методы ММ. Уравнение Шредингера и теория молекулярных орбиталей. Уровни теории: методы Хюккеля, полуэмпирические методы, методы abinitio. Метод Хартри-Фока. Базисные наборы орбиталей. Теория возмущений Меллера-Плессета, теория функционала плотности. Анализ принципов решения задач молекулярного моделирования по сканированию ППЭ и оценки устойчивости таутомеров и конформеров. Решение индивидуальных задач.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство

Индивидуальные задания

Тема 2.3. Типовые задачи молекулярного моделирования.

Типовые задачи ММ. Оптимизация молекулы, расчет нормальный колебаний и термодинамических параметров. Поиск переходного состояния. Сканирование поверхности потенциальной энергии. Расчет спектров ИК и ЯМР. Анализ принципов расчета спектров ИК, УФ и ЯМР методами молекулярного моделирования. Решение индивидуальных задач.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство
Индивидуальные задания

Тема 2.4. Молекулярный докинг.

Анализ ключевых принципов молекулярного докинга. Проведение тестирования.

Текущий контроль (очная форма обучения)

Вид (форма) контроля, оценочное средство
Круглый стол

4.3. Содержание занятий лекционного типа.

Очная форма обучения. Лекции (14 ч.)

Раздел 1. Основы хемоинформатики. (6 ч.)

Тема 1.1. Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования. (2 ч.)

1. Вводная лекция. Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования.

Тема 1.2. Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений. (2 ч.)

1. Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений.

Тема 1.3. Молекулярное подобие и виртуальный скрининг. (2 ч.)

1. Молекулярное подобие и виртуальный скрининг.

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования. (8 ч.)

Тема 2.1. Молекулярное моделирование. Термины и понятия. (2 ч.)

1. Молекулярное моделирование. Термины и понятия.

Тема 2.2. Квантовохимические методы молекулярного моделирования. (2 ч.)

1. Квантовохимические методы молекулярного моделирования.

Тема 2.3. Типовые задачи молекулярного моделирования. (2 ч.)

1. Типовые задачи молекулярного моделирования.

Тема 2.4. Молекулярный докинг. (2 ч.)

1. Молекулярный докинг.

4.4. Содержание занятий семинарского типа.

Очная форма обучения. Практические занятия (28 ч.)

Раздел 1. Основы хемоинформатики. (12 ч.)

Тема 1.1. Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования. (4 ч.)

1. Представление химической информации в компьютерной среде.

Тема 1.2. Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений. (4 ч.)

1. Прогнозирование свойств органических соединений методами хемоинформатики.

Тема 1.3. Молекулярное подобие и виртуальный скрининг. (4 ч.)

1. Поиск количественных соотношений структура-активность (QSAR).

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования. (16 ч.)

Тема 2.1. Молекулярное моделирование. Термины и понятия. (4 ч.)

1. Молекулярное моделирование.

Тема 2.2. Квантовохимические методы молекулярного моделирования. (4 ч.)

1. Сравнение устойчивости изомеров органических веществ.

Тема 2.3. Типовые задачи молекулярного моделирования. (4 ч.)

1. Расчет спектров методами молекулярного моделирования.

Тема 2.4. Молекулярный докинг. (4 ч.)

1. Проведение круглого стола «Молекулярный докинг». Тестирование.

4.5. Содержание занятий семинарского типа.

Очная форма обучения. Консультации в период теоретического обучения (20 ч.)

Раздел 1. Основы хемоинформатики. (6 ч.)

Тема 1.1. Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования. (2 ч.)

1. Консультирование по материалам лекций, самостоятельной работы, практическим занятиям по теме "Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования."

Тема 1.2. Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений. (2 ч.)

1. Консультирование по материалам лекций, самостоятельной работы, практическим занятиям по теме "Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений".

Тема 1.3. Молекулярное подобие и виртуальный скрининг. (2 ч.)

1. Консультирование по материалам лекций, самостоятельной работы, практическим занятиям по теме "Молекулярное подобие и виртуальный скрининг."

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования. (14 ч.)

Тема 2.1. Молекулярное моделирование. Термины и понятия. (2 ч.)

1. Консультирование по материалам лекций, самостоятельной работы, практическим занятиям по теме "Молекулярное моделирование. Термины и понятия."

Тема 2.2. Квантовохимические методы молекулярного моделирования. (2 ч.)

1. Консультирование по материалам лекций, самостоятельной работы, практическим занятиям по теме "Квантовохимические методы молекулярного моделирования."

Тема 2.3. Типовые задачи молекулярного моделирования. (2 ч.)

1. Консультирование по материалам лекций, самостоятельной работы, практическим занятиям по теме "Типовые задачи молекулярного моделирования."

Тема 2.4. Молекулярный докинг. (8 ч.)

1. Консультирование по материалам лекций, самостоятельной работы, практическим занятиям и текущему контролю (6 часов).

2. Консультирование по оформлению портфолио (2 часа).

4.6. Содержание самостоятельной работы обучающихся

Очная форма обучения. Самостоятельная работа студента (40 ч.)

Раздел 1. Основы хемоинформатики. (12 ч.)

Тема 1.1. Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования. (4 ч.)

1. Изучение лекционного материала и материалов основной и литературы по теме "Представление химической информации в компьютерной среде. Методы компьютерного моделирования" (3 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации (1 час).

Тема 1.2. Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений. (4 ч.)

1. Изучение лекционного материала и материалов основной литературы по теме "Основы хемоинформатики. Прогнозирование свойств органических соединений." (3 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации (1 час).

Тема 1.3. Молекулярное подобие и виртуальный скрининг. (4 ч.)

1. Изучение лекционного материала и материалов основной литературы по теме "Молекулярное подобие и виртуальный скрининг." (3 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации (1 час).

Раздел 2. Основы молекулярного моделирования. (28 ч.)

Тема 2.1. Молекулярное моделирование. Термины и понятия. (4 ч.)

1. Изучение лекционного материала и материалов основной литературы по теме "Молекулярное моделирование. Термины и понятия." (3 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации (1 час).

Тема 2.2. Квантовохимические методы молекулярного моделирования. (4 ч.)

1. Изучение лекционного материала и материалов основной литературы по теме "Квантовохимические методы молекулярного моделирования." (3 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации (1 час).

Тема 2.3. Типовые задачи молекулярного моделирования. (4 ч.)

1. Изучение лекционного материала и материалов основной литературы по теме "Типовые задачи молекулярного моделирования" (3 часа).

2. Подготовка к промежуточной аттестации (1 час).

Тема 2.4. Молекулярный докинг. (16 ч.)

1. Изучение литературных источников по теме дискуссии круглого стола. Подготовка и оформление реферата по теме круглого стола (10 часов).

2. Изучение материала лекций, практических занятий и основной литературы по темам тестирования (4 часа).

3. Подготовка к промежуточной аттестации (зачету) (2 часа).

5. Порядок проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация: Зачет, Восьмой семестр.

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета. Зачет проводится в форме оценки портфолио студента.

1. Зачет проводится в период теоретического обучения. Не допускается проведение зачета на последних аудиторных занятиях.

2. Преподаватель принимает зачет только при наличии ведомости и надлежащим образом оформленной зачетной книжки.

3. Результат зачета объявляется студенту непосредственно после его сдачи, затем выставляется в ведомость и зачетную книжку студента. Положительная оценка заносится в ведомость и зачетную книжку, неудовлетворительная оценка проставляется только в ведомости. В случае неявки студента для сдачи зачета в ведомости вместо оценки делается запись «не явился».

Портфолио студента оценивается в категориях «зачтено - не зачтено». Оценка "зачтено" выставляется при соблюдении студентом требований ко всем элементам портфолио.

Если по итогам проведённой промежуточной аттестации хотя бы одна из компетенций не сформирована на уровне требований к дисциплине в соответствии с образовательной

программой (результаты обучающегося не соответствуют критерию сформированности компетенции), обучающемуся выставляется оценка «не зачтено».

Для проведения промежуточной аттестации студент предоставляет преподавателю для проверки портфолио, оформленное в электронном виде. В рамках промежуточной аттестации оценка «зачтено» выставляется, если все элементы портфолио соответствуют требованиям к структуре, содержанию и оформлению.

6. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение дисциплины

6.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная литература

1. Хельтье Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование: теория и практика [Электронный ресурс]: - Москва: Лаборатория знаний, 2020. - 322 - Режим доступа: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001017240.html>

Дополнительная литература

1. Тюкавкина Н.А. Органическая химия [Электронный ресурс]: - Москва: ГЭОТАР-Медиа, 2019. - 640 - Режим доступа: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970449226.html>

6.2. Профессиональные базы данных и ресурсы «Интернет», к которым обеспечивается доступ обучающихся

Профессиональные базы данных

Не используются.

Ресурсы «Интернет»

1. <http://www.way2drug.com/About.php>. - Way2Drug [сайт] : веб-ресурс для предсказания биологической активности

6.3. Программное обеспечение и информационно-справочные системы, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое свободно распространяемое и лицензионное ПО, в т.ч. MS Office.

Программное обеспечение для адаптации образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья:

Программа экранного доступа Nvda - программа экранного доступа к системным и офисным приложениям, включая web-браузеры, почтовые клиенты, Интернет-мессенджеры и офисные пакеты. Встроенная поддержка речевого вывода на более чем 80 языках. Поддержка большого числа брайлевских дисплеев, включая возможность автоматического обнаружения многих из них, а также поддержка брайлевского ввода для дисплеев с брайлевской клавиатурой. Чтение элементов управления и текста при использовании жестов сенсорного экрана.

Перечень программного обеспечения

(обновление производится по мере появления новых версий программы)

Не используется.

Перечень информационно-справочных систем

(обновление выполняется еженедельно)

Не используется.

6.4. Специальные помещения, лаборатории и лабораторное оборудование

Для обеспечения реализации дисциплины используется оборудование общего назначения, специализированное оборудование, оборудование, обеспечивающее адаптацию электронных и печатных образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья, наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий по списку.

Оборудование общего назначения:

Презентационное оборудование (мультимедиа-проектор, экран, компьютер для управления) - для проведения лекционных и семинарских занятий.

Компьютерный класс (с выходом в Internet) - для организации самостоятельной работы обучающихся.

Оборудование, обеспечивающее адаптацию электронных и печатных образовательных ресурсов для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья (место размещения - учебно-методический отдел, устанавливается по месту проведения занятий (при необходимости)):

Устройство портативное для увеличения DION OPTIC VISION - предназначено для обучающихся с нарушением зрения с целью увеличения текста и подбора контрастных схем изображения;

Электронный ручной видеоувеличитель Bigger D2.5-43 TV - предназначено для обучающихся с нарушением зрения для увеличения и чтения плоскочечатного текста;

Радиокласс (радиомикрофон) «Сонет-PCM» РМ-6-1 (заушный индиктор) - портативная звуковая FM-система для обучающихся с нарушением слуха, улучшающая восприятие голосовой информации.

Специализированное оборудование:

учебные помещения

"Компьютер ""Некс Оптима 2013"" - 1 шт.

Ванна ультразвуковая (9,5 л) - 1 шт.

Весы ВЛТЭ-150 - 1 шт.

Водонагреватель Gorenje OTG 50 SLSIMB - 1 шт.

Дозатор 1-канальный 100-1000мкл - 1 шт.

Дозатор 1-канальный 20мкл - 1 шт.

Компьютер Case Super Rower AP6235-CA P4 - 1 шт.

Ноутбук Lenovo IdeaPad G710 - 1 шт.

Печь муфельная LF-5/11-G1 - 1 шт.

Установка для регенерации растворителей Hei-Var Advantage ML/G3, в комплекте. - 1 шт.

"Компьютер ""Некс Оптима 2013"" - 1 шт.

Ванна ультразвуковая (9,5 л) - 1 шт.

Весы ВЛТЭ-150 - 1 шт.

Водонагреватель Gorenje OTG 50 SLSIMB - 1 шт.

Дозатор 1-канальный 100-1000мкл - 1 шт.

Дозатор 1-канальный 20мкл - 1 шт.

Компьютер Case Super Rower AP6235-CA P4 - 1 шт.

Ноутбук Lenovo IdeaPad G710 - 1 шт.

Печь муфельная LF-5/11-G1 - 1 шт.

Установка для регенерации растворителей Hei-Var Advantage ML/G3, в комплекте. - 1 шт.

7. Методические указания по освоению дисциплины (модуля)

В ходе реализации учебного процесса по дисциплине проводятся учебные занятия и

выполняется самостоятельная работа. По вопросам, возникающим в процессе выполнения самостоятельной работы, проводятся консультации.

Для организации и контроля самостоятельной работы обучающихся, а также проведения консультаций применяются информационно-коммуникационные технологии:

Информирование: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=2457>

Консультирование: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=2457>

Контроль: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=2457>

Размещение учебных материалов: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=2457>

Учебно-методическое обеспечение:

Чернов Н.М. Основы компьютерного моделирования в органической химии : электронный учебно-методический комплекс / Н.М. Чернов ; ФГБОУ ВО СПХФУ Минздрава России. – Санкт-Петербург, 2018. – Текст электронный // ЭИОС СПХФУ : [сайт]. – URL: <http://edu.spcpu.ru/course/view.php?id=2457>. — Режим доступа: для авторизованных пользователей.

Методические указания по формам работы

Консультации в период теоретического обучения

Консультации в период теоретического обучения предназначены для разъяснения порядка выполнения самостоятельной работы и ответа на сложные вопросы в изучении дисциплины.

Лекции

Лекции предназначены для сообщения обучающимся необходимого для изучения дисциплины объема теоретического материала. В рамках лекций преподавателем могут реализовываться следующие интерактивные образовательные технологии: дискуссия, лекция с ошибками, видеоконференция, вебинар.

Практические занятия

Практические занятия предусматривают применение преподавателем различных интерактивных образовательных технологий и активных форм обучения: дискуссия, деловая игра, круглый стол, мини-конференция. Текущий контроль знаний осуществляется на практических занятиях и проводится в форме:

Индивидуальных заданий

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой средство, позволяющее оценивать и диагностировать знание фактического материала (базовые понятия, алгоритмы, факты) и умение правильно использовать специальные термины и понятия, узнавание объектов изучения в рамках определенного раздела дисциплины.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: комплект задач и заданий

Круглого стола

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой средства, позволяющие включить обучающихся в процесс обсуждения спорного вопроса, проблемы и оценить их умение аргументировать собственную точку зрения.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: Перечень дискуссионных тем для проведения круглого стола.

Тест

Краткая характеристика оценочного средства: представляет собой систему стандартизированных заданий, позволяющую автоматизировать процедуру измерения уровня знаний и умений обучающегося.

Представление оценочного средства в оценочных материалах: спецификация банка тестовых заданий