

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол № 5 от «24» января 2022 г.
Зав. кафедрой Мустафин А.Г. /Мустафин А.Г.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета

Гарифуллина Г.Г. /Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

дисциплина «Дизайн-структура-свойство новых материалов»

Часть, формируемая участниками образовательных отношений

программа магистратуры

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки
Новые материалы в нефтехимии и других отраслях

Квалификация
Магистр

Разработчик (составитель)
Профессор, д. х. н., доцент

Хайруллина В.Р. Хайруллина В.Р.

Для приема: 2022 г.

Уфа 2022 г.

Составитель / составители: Хайруллина В.Р., д.х.н., доцент, профессор кафедры физической химии и химической экологии

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 5 от «24» января 2022 г.

Заведующий кафедрой



_____ / Мустафин А.Г.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	8
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	8
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	9
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.	9
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.	19
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	28
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	32
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы	33
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	34

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Профессиональная компетенция	ПК-1. способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	ПК-1.1. Знать научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.
		ПК-1.2. Знать основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.
		ПК-1.3. Уметь на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	Уметь: на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа
		ПК-1.4 Уметь правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике

		<i>ПК-1.5</i> Владеть начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	Владеть: начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.
		<i>ПК-1.6</i> Владеть навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации
Профессиональная компетенция	ПК-7 Способен организовывать проведение анализа и анализировать структуру новых материалов, адаптировать методики исследования свойств материалов к потребностям производства и разрабатывать специальные методики	ПК-7.1. Знать принципы организации проведения анализа структуры новых материалов	Знать: принципы организации проведения анализа структуры новых материалов
		ПК-7.2. Уметь адаптировать методики исследования свойств материалов к потребностям производства	Уметь: адаптировать методики исследования свойств материалов к потребностям производства
		ПК-7.3. Владеть навыками разработки специальных методик исследования структуры материалов	Владеть: навыками разработки специальных методик исследования структуры материалов

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Дизайн-структура-свойство новых материалов» относится к части ОП, формируемой участниками образовательных отношений.

Дисциплина изучается на 1 курсе в 1 семестре.

Основными целями освоения дисциплины «Дизайн-структура-свойство новых материалов» являются:

1. – формирование у магистрантов базовых понятий в области математического моделирования и теоретического изучения взаимосвязи между структурой химических соединений и различными видами биологической активности, степени выраженности физико-химических свойств;
2. – изложение современных представлений об уровне научных достижений, применяемых подходах и проблемах теоретического изучения связи между строением химических соединений и их физико-химическими свойствами;
3. – дать краткое описание отечественных и зарубежных компьютерных систем, позволяющих выявлять закономерности между строением и свойствами различных классов химических соединений, на количественном и качественном уровне.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин:

«Органическая химия», «Физическая химия», «Квантовая химия», «Информатика», «Биология с основами экологии», «Высшая математика», «Биохимия», «Иностранный язык», «Физика (раздел «Атомная физика»)», «Медицинская химия».

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

КАРТА КОМПЕТЕНЦИИ

Код и формулировка компетенции **ПК-1.** способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Не удовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
ПК-1.1. Знать научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Затрудняется в определении научной новизны и практической значимости полученных данных	Формулирует с ошибками научную новизну и практическую значимость полученных данных	В целом верно формулирует научную новизну и практическую значимость полученных данных, требуется правка специалистом	Знает научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении НИР
ПК-1.2. Знать основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	Затрудняется в выборе литературы по тематике исследования. Плохо ориентируется в преимуществах и недостатках экспериментальных методов	Для работы с литературой требуется начальный список. Плохо ориентируется в преимуществах и недостатках теоретических методов	Не всегда выбирает адекватную литературу. Допускает неточности в оценке преимуществ и недостатков теоретических и экспериментальных методов	Уверенно выбирает литературу по тематике исследования, знает преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.
ПК-1.3. Уметь на основе литературы выделять и	Уметь: на основе литературы выделять и использовать	Затрудняется в выделении теоретической основы	Определяет отдельные теоретические положения	В целом верно определяет теоретическую	Самостоятельно определяет теоретическую основу

использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	экспериментальных методов используемых в НИР	экспериментальных методов.	ю основу экспериментальных методов НИР.	экспериментальных методов НИР с привлечением литературы
ПК-1.4 Уметь правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	Затрудняется в составлении конспекта	Составляет конспект, ошибается в определении главных положений предшествующих работ по теме НИР	Составляет конспект, определяет главные положения предшествующих работ с помощью специалиста в данной области	Правильно составляет конспекты, самостоятельно выделяет главные положения предшествующих работ
ПК-1.5 Владеть начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	Владеть: начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	Затрудняется в проведении первичного литературного анализа в выбранной области исследований	Затрудняется в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных.	Проводит литературный анализ. Формулирует тематику НИР с последующей правкой и уточнениями специалистом	Способен формулировать тематику НИР по результатам литературного анализа в выбранной области исследований.
ПК-1.6 Владеть навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	Затрудняется в проведении экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР диссертации	Владеет ограниченным набором навыков экспериментальных работ	Владеет ограниченным набором навыков экспериментальных и теоретических работ	Показывает уверенное владение навыками экспериментальных и теоретических работах по теме НИР диссертации

КАРТА КОМПЕТЕНЦИИ

Код и формулировка компетенции **ПК-7** Способен организовывать проведение анализа и анализировать структуру новых материалов, адаптировать методики исследования свойств материалов к потребностям производства и разрабатывать специальные методики

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
ПК-7.1. Знает принципы организации проведения анализа структуры новых материалов	Знает: принципы организации проведения анализа структуры новых материалов	Не знает	Знает основные принципы организации проведения анализа структуры новых материалов, но допускает значительные погрешности	Знает основные принципы организации проведения анализа структуры новых материалов	Знает большинство о принципов организации проведения анализа структуры новых материалов
ПК-7.2. Умеет адаптировать методики исследования свойств материалов к потребностям производства	Умеет: адаптировать методики исследования свойств материалов к потребностям производства	Не умеет	Умеет адаптировать основные методики исследования свойств материалов к потребностям производства, но допускает значительные погрешности	Умеет адаптировать основные методики исследования свойств материалов к потребностям производства	Демонстрирует свободное и уверенное умение адаптировать методики исследования свойств материалов к потребностям производства
ПК-7.3. Владеет навыками разработки специальных методик исследования структуры материалов	Владеет: навыками разработки специальных методик исследования структуры материалов задачи.	Не владеет	Владеет навыками разработки специальных методик исследования структуры материалов под руководством опытных наставников	Владеет основными навыками разработки специальных методик исследования структуры материалов задачи.	Полностью владеет навыками разработки специальных методик исследования структуры материалов задачи.

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и наименование индикатора компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
<i>ПК-1.1.</i> Знать научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
<i>ПК-1.2.</i> Знать основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	
<i>ПК-1.3.</i> Уметь на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	Уметь: на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	
<i>ПК-1.4</i> Уметь правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	
<i>ПК-1.5</i> Владеть начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	Владеть: начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	

<i>ПК-1.6</i> Владеть навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	
<i>ПК-3.1.</i> Знать оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
<i>ПК-3.2.</i> Уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	
<i>ПК-3.3.</i> Владеть основами пробоподготовки для проведения различных ФХА.	Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных ФХА.	
<i>ПК-3.4.</i> Владеть начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	
<i>ПК-4.1.</i> Знать основные правила ведения научной дискуссии	Знать: основные правила ведения научной дискуссии	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
<i>ПК-4.2.</i> Знать основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР	Знать: Основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР	
<i>ПК-4.3.</i> Уметь высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории).	Уметь: высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории).	
<i>ПК-4.4.</i> Владеть навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию	Владеть: навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию	

<i>ПК-7.1.</i> Знать основные физико-химические, биохимические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	Знать основные физико-химические, биохимические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
<i>ПК-7.2.</i> Уметь использовать основные физико-химические, биохимические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	Уметь использовать основные физико-химические, биохимические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	
<i>ПК-7.3.</i> Владеть способностью использовать основные физико-химические, биохимические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	Владеть способностью использовать основные физико-химические, биохимические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	

Промежуточная аттестация осуществляется в форме экзамена. Сроки аттестационных испытаний устанавливаются учебным планом основной образовательной программы, графиком учебного процесса на учебный год и приказом ректора, регламентирующим проведение экзаменационных сессий.

Для этой формы промежуточной аттестации разработаны шкалы, критерии и процедуры оценивания частей и компонентов (знать, уметь, владеть) компетенций.

Текущий контроль знаний, умений и навыков для оценивания компонентов дисциплинарных частей компетенций осуществляется на протяжении всех лекционных и лабораторных занятий в 1 семестре. Он проводится после изучения новой темы с целью выяснения наиболее сложных вопросов, степени усвоения информации, поддержания внимания слушающей аудитории, а также каждым студентом индивидуально.

Студенты пишут одну контрольную работу, сдают отчеты в электронном виде по пяти лабораторным работам, выступают с презентациями по одному из разделов лекционного курса, участвуют в разборе различных ситуационных задач.

Рубежный контроль осуществляется проведением тестирования.

Результаты активности студентов оцениваются по 4х-балльной шкале и заносятся в книжку преподавателя. Они учитываются в виде интегральной оценки при проведении промежуточной аттестации.

Структура экзаменационного билета:

Экзаменационный билет включает в себя три теоретических вопроса из разных разделов программы. Оценка успешности освоения дисциплины формируется по четырехбалльной системе:

- «неудовлетворительно»;
- «удовлетворительно»;
- «хорошо»;

Вопросы к экзамену

1. Ветви теоретической химии и решаемые с их помощью задачи. Краткая характеристика методов молекулярной динамики, молекулярной механики, квантовой химии, молекулярного моделирования и хемоинформатики. Достоинства, недостатки этих методов. Их возможности в решении практических и фундаментальных задач органической и неорганической химии.
2. Вычислительная химия как способ проведения химических исследований. Типовые задачи вычислительной химии.
3. Хемоинформатика как научная дисциплина. Определение. Научные направления, объединяемые хемоинформатикой.
4. Хемо- и биоинформатика в решении основных задач физической органической химии.
5. Понятие о моделировании «структура-свойство» и «структура-активность» в хемоинформатике.
6. Индуктивный и дедуктивный подходы в хемо- и биоинформатике. Цели, преследуемые хемоинформатикой.
7. Молекулярная механика как метод расчета геометрии и энергии молекул. Преимущества и недостатки этого метода.
8. Понятие «силовое поле» в вычислительной химии. Метод силовых полей как метод, реализующий основную идею молекулярной механики.
9. Расчет полной энергии молекулы и ее энергетических составляющих в методе силовых полей.
10. Связывающие и несвязывающие взаимодействия в молекулах.
11. Теоретические основы метода молекулярной динамики. Представление молекул органических соединений в методе молекулярной динамики.
12. Межатомные взаимодействия и суммарные силы в молекулах в методе молекулярной динамики. Расчет эволюции молекулярных систем, а также траектории их движения во времени. Достоинства, недостатки этого метода, его возможности в решении практических и фундаментальных задач органической и неорганической химии.
13. Понятие «химическое пространство». Основные способы представления химических соединений (структурная формула, брутто-формула, тривиальное название, название в соответствии с номенклатурой ИЮПАК).
14. Графы и векторы дескрипторов) как способы представления молекул. Понятие молекулярного графа в теоретической химии. Молекулярно-графовое представление органических молекул.
15. Описание структур химических соединений с использованием векторов молекулярных дескрипторов. Понятие дескриптора в вычислительной химии. Требования, применяемые к молекулярным дескрипторам. Желательные характеристики дескриптора.
16. Современные классификации дескрипторов. 1D-4D-дескрипторы и 1D-4D –представления молекул в вычислительной химии.
17. Расчет мер сходства химических соединений на основе различных типов метрик (эвклидово, манхэттенское расстояние, расстояние Махаланобиса, Минковского и т.д.), коэффициента Танимото, Дайса, Карбо, Тверского и т.д.
18. Классификация представлений химических соединений в зависимости от их организации (линейное, представления молекулярных графов, трехмерные и четырехмерные представления. Понятие «матрица связей», «матрица расстояний», «матрица смежности», структуры Маркуша, Z-матрица в вычислительной химии.
19. Современные требования к стандартным обменным форматам файлов. Классификация стандартных обменных форматов файлов. Форматы MDL, SDF, RXN, RDF, Sybyl mol2, PDB, CML, их достоинства, а также ограничения, совместимость с современными компьютерными программами и пакетами программ.
20. Конвертация между различными представлениями молекул в вычислительной химии и возникающие при этом основные проблемы.

21. Подходы для автоматической конвертации 2D-структур в 3D.
22. Программы для автоматической конвертации между различными представлениями молекул и основные требования к ним.
23. Общие сведения о базах данных. Компоненты информационной системы (приложения и системы баз данных). Организация информационной системы. Понятие о картридже данных и метаданных. Типы баз данных (иерархическая система, базы данных сетевого типа, реляционные базы данных).
24. Типы баз данных по Энгелю (литературные, фактографические, структурные).
25. Виды структурного поиска в различных химических базах данных (поиск по структуре, подструктуре, надструктуре, по подобию).
26. Эксперимент, пространство выборки и результат. Статистика и вероятность. Повторение испытаний. Закон больших чисел. Центральная предельная теорема. Сбор и анализ данных. Сжатие данных.
27. Понятие «регрессионный анализ». Общие принципы построения регрессионных моделей.
28. Принципиальные отличия между SAR QSPR/QSAR-моделями. Расчет и физический смысл регрессионных коэффициентов. Построение регрессионных моделей, описывающих количественную связь «структура-свойство» и «структура-активность» и критерии их адекватности (модели QSPR/QSAR). F-статистика в регрессионном анализе.
29. Этапы регрессионного анализа при построении регрессионных моделей. Основные требования к регрессионным моделям.
30. Пакеты программ для обработки исходных данных, расчета разных типов дескрипторов и построения QSPR/QSAR-моделей.
31. Предобработка данных перед построением QSPR/QSAR-моделей. Математическая предобработка данных. Краткая характеристика 1D-6D-методов моделирования QSAR.
32. Множественная линейная регрессия. Достоинства и недостатки метода.
33. Метод частичных наименьших квадратов. Достоинства и недостатки метода.
34. Метод ближайших соседей. Достоинства и недостатки метода.
35. Искусственные нейронные сети. Достоинства и недостатки метода.
36. Метод опорных векторов. Достоинства и недостатки метода.
37. Деревья принятия решений. Достоинства и недостатки метода.
38. Суть метода молекулярного докинга. Алгоритмы молекулярного докинга и программные пакеты, реализующие этот метод.
39. Виды методов молекулярного докинга и их использование в решении прикладных задач.
40. Сочетание метода молекулярного докинга с другими методами молекулярного моделирования.

Структура экзаменационного билета:

Экзаменационный билет включает в себя три теоретических вопроса из разных разделов программы.

Образец экзаменационного билета

МИНОБРНАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

Кафедра физической химии и химической экологии

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

по дисциплине Дизайн-структура-свойство новых материалов

Направление 04.04.01 «Химия»

Направленность «Физическая химия»

1. Ветви теоретической химии и решаемые с их помощью задачи.
2. Краткая характеристика методов молекулярной динамики, молекулярной механики, квантовой химии, молекулярного моделирования и хемоинформатики. Достоинства, недостатки этих методов. Их возможности в решении практических и фундаментальных задач органической и неорганической химии.
3. С использованием программы MarvinSketch рассчитайте ЯМР-спектр для молекулы C_4H_{10} . Определите номер CAS для этого соединения.

Утверждено на заседании кафедры 24.01.2022, протокол № 5

Заведующий кафедрой физической химии
и химической экологии БашГУ, проф.

А.Г. Мустафин

2022-2023 уч. г. Кафедра ФХ и ХЭ

Критерии оценки на экзамене:

- **оценка 5 (отлично)** выставляется студенту, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Студент без затруднений ответил на все дополнительные вопросы.

Практическая часть работы выполнена полностью без неточностей и ошибок;

- **оценка 4 (хорошо)** выставляется студенту, если студент раскрыл в основном теоретические вопросы, однако допущены неточности в определении основных понятий. При ответе на дополнительные вопросы допущены небольшие неточности. При выполнении практической части работы допущены несущественные ошибки;

- **оценка 3 (удовлетворительно)** выставляется студенту, если при ответе на теоретические вопросы студентом допущено несколько существенных ошибок в толковании основных понятий. Логика и полнота ответа страдают заметными изъянами. Заметны пробелы в знании основных методов. Теоретические вопросы в целом изложены достаточно, но с пропусками материала. Имеются принципиальные ошибки в логике построения ответа на вопрос. Студент не решил задачу или при решении допущены грубые ошибки;

- **оценка 2 (неудовлетворительно)** выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Студент не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

Критерии оценки (в баллах) выступления с презентацией и докладом, реферата - 0 баллов выставляется студенту, если . студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;

- **оценка 2 (неудовлетворительно)** выставляется студенту, если студент демонстрирует незнание теоретических основ предмета, не умеет делать аргументированные выводы и приводить примеры, почти не владеет монологической речью, не владеет терминологией, проявляет отсутствие логичности и последовательностью изложения, делает ошибки, которые не может исправить даже при коррекции преподавателем, отказывается отвечать на занятии);

- **оценка 3 (удовлетворительно)** выставляется студенту, если студент имеет не в достаточной мере сформированные и содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует неглубокие теоретические знания, проявляет слабо сформированные навыки анализа явлений и процессов, недостаточное умение делать аргументированные выводы и приводить примеры, показывает не достаточно свободное владение монологической речью, терминологией, логичностью и последовательностью изложения, делает ошибки, которые может исправить только при коррекции преподавателем);

- оценка 4 (хорошо) выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует прочные теоретические знания, владеет терминологией, делает аргументированные выводы и обобщения, приводит примеры, показывает свободное владение монологической речью, но при этом делает несущественные ошибки, которые быстро исправляет самостоятельно или при незначительной коррекции преподавателем);

- оценка 5 (отлично) выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует системные теоретические знания, владеет терминологией, делает аргументированные выводы и обобщения, приводит примеры, показывает свободное владение монологической речью и способность быстро реагировать на уточняющие вопросы).

Критерии оценки участия студентов в разборе типовых задач

- **оценка 2** (неудовлетворительно) за решение каждой ситуационной задачи выставляется студенту, если он демонстрирует незнание теоретических основ предмета, не умеет делать аргументированные выводы и приводить примеры, показывает слабое владение монологической речью, не владеет терминологией, проявляет отсутствие логичности и последовательностью изложения, делает ошибки, которые не может исправить даже при коррекции преподавателем, отказывается отвечать на занятии);

оценка 3 (удовлетворительно) за решение каждой ситуационной задачи выставляется студенту, если он имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует неглубокие теоретические знания, проявляет слабо сформированные навыки анализа явлений и процессов, недостаточное умение делать аргументированные выводы и приводить примеры, показывает не достаточно свободное владение монологической речью, терминологией, логичностью и последовательностью изложения, делает ошибки, которые может исправить только при коррекции преподавателем).

- **оценка 4** (хорошо) за решение каждой ситуационной задачи выставляется студенту если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует прочные теоретические знания, владеет терминологией, делает аргументированные выводы и обобщения, приводит примеры, показывает свободное владение монологической речью, но при этом делает несущественные ошибки, которые быстро исправляет самостоятельно или при незначительной коррекции преподавателем);

- **оценка 5** (отлично) за решение каждой ситуационной задачи выставляется студенту если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует системные теоретические знания, владеет терминологией, делает аргументированные выводы и обобщения, приводит примеры, показывает свободное владение монологической речью и способность быстро реагировать на уточняющие вопросы).

ПРОГРАММА ГРУППОВЫХ ЗАНЯТИЙ

Раздел 1. Введение. Классификация вычислительных методов

Предмет дисциплины. Применение методов теоретической химии в решении практических задач. Ветви теоретической химии и решаемые с их помощью задачи. Взаимосвязь между различными направлениями теоретической химии. Краткая характеристика методов молекулярной динамики, молекулярной механики, квантовой химии, молекулярного моделирования и хемоинформатики. Достоинства, недостатки этих методов. Их возможности в решении практических и фундаментальных задач органической и неорганической химии. Вычислительная химия как способ проведения химических исследований. Типовые задачи вычислительной химии.

Раздел 2. Хемоинформатика как научная дисциплина

Определение. Научные направления, объединяемые хемоинформатикой. Хемо- и биоинформатика в решении основных задач физической органической химии. Понятие о

моделировании «структура-свойство» и «структура-активность» в хемоинформатике. Индуктивный и дедуктивный подходы в хемо- и биоинформатике. Цели, преследуемые хемоинформатикой.

Основные возможности программы MarvinSketch.

Раздел 3. Молекулярная механика в решении научных задач

Молекулярная механика как метод расчета геометрии и энергии молекул. Преимущества и недостатки этого метода. Понятие «силовое поле» в вычислительной химии. Метод силовых полей как метод, реализующий основную идею молекулярной механики. Расчет полной энергии молекулы и ее энергетических составляющих. Связывающие и несвязывающие взаимодействия в молекулах.

Лабораторное занятие 4. Молекулярная динамика в решении научных задач

Теоретические основы метода молекулярной динамики. Представление молекул органических соединений в методе молекулярной динамики. Межатомные взаимодействия и суммарные силы в молекулах в методе молекулярной динамики. Расчет эволюции молекулярных систем, а также траектории их движения во времени. Достоинства, недостатки этого метода, его возможности в решении практических и фундаментальных задач органической и неорганической химии.

Раздел 5. Способы представления химических соединений в вычислительной химии

Понятие «химическое пространство». Основные способы представления химических соединений (структурная формула, брутто-формула, тривиальное название, название в соответствии с номенклатурой ИЮПАК). Графы и векторы дескрипторов) как способы представления молекул. Понятие молекулярного графа в теоретической химии. Молекулярно-графовое представление органических молекул. Описание структур химических соединений с использованием векторов молекулярных дескрипторов. Понятие дескриптора в вычислительной химии. Требования, применяемые к молекулярным дескрипторам. Желательные характеристики дескриптора. Современные классификации дескрипторов. 1D-4D-дескрипторы и 1D-4D –представления молекул в вычислительной химии. Расчет мер сходства химических соединений на основе различных типов метрик (эвклидово, манхэттенское расстояние, расстояние Махаланобиса, Минковского и т.д.), коэффициента Танимото, Дайса, Карбо, Тверского и т.д.

Классификация представлений химических соединений в зависимости от их организации (линейное, представления молекулярных графов, трехмерные и четырехмерные представления. Понятие «матрица связей», «матрица расстояний», «матрица смежности», структуры Маркуша, Z-матрица в вычислительной химии.

Раздел 6. Стандартные обменные форматы файлов в вычислительной химии

Современные требования к стандартным обменным форматам файлов. Классификация стандартных обменных форматов файлов. Форматы MDL, SDF, RXN, RDF, Sybyl mol2, PDB, CML, их достоинства, а также ограничения, совместимость с современными компьютерными программами и пакетами программ.

Конвертация между различными представлениями молекул в вычислительной химии и возникающие при этом основные проблемы. Подходы для автоматической конвертации 2D-структур в 3D. Программы для автоматической конвертации между различными представлениями молекул и основные требования к ним.

Раздел 7. Химические базы данных

Общие сведения о базах данных. Компоненты информационной системы (приложения и системы баз данных). Организация информационной системы. Понятие о картридже данных и метаданных. Типы баз данных (иерархическая система, базы данных сетевого типа, реляционные базы данных).

Типы баз данных по Энгелю (литературные, фактографические, структурные).

Виды структурного поиска в различных химических базах данных (поиск по структуре, подструктуре, надструктуре, по подобию).

Раздел 8. Регрессионный анализ и QSPR/QSAR-моделирование на его основе

Эксперимент, пространство выборки и результат. Статистика и вероятность. Повторение испытаний. Закон больших чисел. Центральная предельная теорема. Сбор и анализ данных. Сжатие данных.

Понятие «регрессионный анализ». Общие принципы построения регрессионных моделей. Принципиальные отличия между SAR QSPR/QSAR-моделями. Расчет и физический смысл регрессионных коэффициентов. Построение регрессионных моделей, описывающих количественную связь «структура-свойство» и «структура-активность» и критерии их адекватности (модели QSPR/QSAR). F-статистика в регрессионном анализе. Этапы регрессионного анализа при построении регрессионных моделей. Основные требования к регрессионным моделям.

Пакеты программ для обработки исходных данных, расчета разных типов дескрипторов и построения QSPR/QSAR-моделей.

Предобработка данных перед построением QSPR/QSAR-моделей. Математическая предобработка данных. Краткая характеристика 1D-6D-методов моделирования QSAR.

Раздел 9. Методы машинного обучения, используемых для построения SAR-и QSPR/QSAR-моделей

Множественная линейная регрессия. Метод частичных наименьших квадратов.

Метод ближайших соседей

Искусственные нейронные сети.

Метод опорных векторов.

Деревья принятия решений.

Достоинства и недостатки этих методов.

Раздел 10. Молекулярное моделирование с использованием метода молекулярного докинга

Суть метода молекулярного докинга. Алгоритмы молекулярного докинга и программные пакеты, реализующие этот метод. Виды методов молекулярного докинга и их использование в решении прикладных задач.

Сочетание метода молекулярного докинга с другими методами молекулярного моделирования.

П Л А Н

Лабораторных занятий по курсу «Дизайн-структура-свойство новых материалов»

Лабораторное занятие 1. Освоение основных правил работы с текстовыми и графическими редакторами в системе Linux

Повтор основных правил работы с текстовыми и графическими редакторами в системе Linux (Libre Office (Calc, Writer, Impress, Base и т.д.).

Освоение основных возможностей программы MarvinSketch

Работа с командами MarvinSketch через строку меню.

Для освоения программы MarvinSketch рекомендуется прочесть методическую разработку по соответствующей теме и посмотреть видеоуроки, доступные по следующим ссылкам:

<https://www.youtube.com/watch?v=N-idU05G9YA> (длительность: 3 мин 43 сек.)

https://www.youtube.com/watch?v=Lw_dWPdXJy8<https://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch/> (длительность: 18 мин 02 сек.).

<https://www.youtube.com/watch?v=RT8knhfFhM> (длительность: 5 мин 22 сек.).

<https://docs.chemaxon.com/display/docs/MarvinSketch+User's+Guide>.

Построение структур химических соединений с использованием программы MarvinSketch

Преподаватель предлагает построить структуры указанных им соединений (не меньше 10) в редакторе Marvin Sketch в 2 D-формате а) с явными и б) с неявными атомами водорода в форматах mol, mol2, sdf, pdb, xyz.

Конвертация молекул органических соединений в различные представления и присвоение и систематического названия соединениям с использованием программы MarvinSketch

Преподаватель предлагает с использованием программы MarvinSketch конвертировать структуры, построенные в лабораторной работе № 3, в 3 D-формат, воспользовавшись соответствующими командами в редакторе Marvin Sketch. Затем требуется дать название построенным молекулам по системе ИЮПАК.

Кроме того, в этой лабораторной работе студенты должны построить структуры химических соединений по тривиальным названиям в 2 D- и 3D-форматах а) с явными и б) с неявными атомами водорода в форматах файлов mol, mol2, sdf, pdb, xyz. Затем требуется дать систематические названия по системе ИЮПАК всем структурам, построенным по их тривиальным названиям. Результаты необходимо оформить в виде отчета.

Топологический анализ структур органических соединений

От студентов требуется с использованием программы MarvinSketch выполнить топологический анализ соединений, построенных в ходе выполнения лабораторных работ № 3 и 4 и заполнить таблицы, в которых указать молекулярную массу соединений, процентное содержание каждого из атомов в анализируемых молекулах, число алифатических, ароматических атомов углерода, число алифатических, ароматических и гетероароматических колец в этих же молекулах.

Лабораторное занятие 2. Расчет таутомеров, стереоизомеров, конформеров и резонансных форм органических соединений, а также их физико-химических свойств с использованием программы MarvinSketch

От студентов требуется с использованием программы MarvinSketch рассчитать все возможные таутомеры, стереоизомеры, конформеры и резонансные формы для указанных преподавателем соединений. Определить, в какой таутомерной форме будут находиться молекулы при разных значениях pH. Оценить собственный электрический дипольный момент для анализируемых соединений, рассчитайте для них pKa, растворимость в воде, липофильность в виде показателя logP при разных значениях pH среды.

Расчет спектров ЯМР 1H и 13C для органических соединений

От студентов требуется с использованием программы MarvinSketch рассчитать ЯМР-спектры для указанных преподавателем соединений, парциальные заряды на всех атомах в них, полную энергию в силовых полях Дрейдинга и MMFF94.

Лабораторное занятие 3. Знакомство с базой данных ChEMBL

В базе данных ChEMBL задать поиск химических соединений, указанных преподавателем, а также их структурных аналогов, отличающихся от исходных структур на 10%, 30% и 50%.

Ознакомиться с биологическими и химическими данными о каждом из найденных веществ.

Знакомство с базой данных DrugBank

В базе данных DrugBank задать поиск химических соединений, указанных преподавателем, а также их структурных аналогов, отличающихся от исходных структур на 10%, 30% и 50%. Ознакомиться с биологическими данными о каждом из найденных веществ (токсичность, период полураспада, ADMET-свойства).

Работа с веб-сервером Common Chemistry

Просмотреть видеоуроки о работе с базой данных CAS. В веб-сервере Common Chemistry. Определить номер CAS для химических соединений, указанных преподавателем, и задать поиск этих соединений по их систематическим названиям на данном сервере, а также в каталоге Sigma-Aldrich. Ознакомиться с информацией о заданных веществах, содержащейся в данном каталоге.

Знакомство с базой данных PubChem

В базе данных PubChem задать поиск химических соединений, указанных преподавателем. Ознакомиться с биологическими данными о каждом из найденных веществ (токсичность, температура кипения, плавления, растворимость в воде).

Знакомство с базами данных NIST

В базе данных NIST задать поиск химических соединений, указанных преподавателем. Получить сведения о возможных изомерах этих веществ, их термодинамических данных в газовой и жидкой средах, критическом состоянии, растворимости, данные ИК- и масс-спектропии.

Получите термодинамические и кинетические данные о реакциях получения и превращения анализируемых веществ с указанием литературных источников.

Оценка термодинамических характеристик органических соединений в базах данных NIST

В базе данных NIST задать поиск реакций синтеза и превращения для химических соединений, указанных преподавателем. По уравнениям Кирхгофа и Гиббса-Гельмгольца рассчитать изменение энтальпии, внутренней энергии и энергии Гиббса для выбранных реакций при температурах 27, 35 и 55°C. Для этих же реакций по уравнению Аррениуса:

$k = A * e^{\frac{-E_{act}}{RT}}$, $R = 8.314 kJ / mol * K$ рассчитать численное значение констант скорости при температуре 27, 35 и 55°C.

Лабораторная работа № 4. Оценка токсичности и биоаккумуляционного фактора органических соединений с использованием программы GUSAR 2011

От студентов требуется внимательно ознакомиться с веб-сервером, на котором находятся модели QSAR, построенные с использованием программы GUSAR 2011. Ответить на следующие вопросы:

- А) В чем заключается суть самосогласованной регрессии?
- Б) С какими форматами файлов работает программа GUSAR?
- В) На базе каких типов дескрипторов строятся QSAR-модели в GUSAR?
- Г) Какой математический аппарат заложен в основу построения QNA- дескрипторов?
- Д) На каких видах биологической активности апробирована эта программа?

Кратко охарактеризуйте принцип построения регрессионных моделей в программе GUSAR на основании текстового и иллюстративного материала, находящегося на этой странице.

Кроме того, необходимо ознакомиться с характеристиками онлайн-моделей QSAR-моделей, предназначенных для расчета острой токсичности.

Затем необходимо провести расчет острой токсичности для указанных преподавателем соединений с использованием этих моделей.

От студентов требуется внимательно ознакомиться с характеристиками онлайн-моделей QSAR-моделей, построенными с использованием программы GUSAR 2011, и предназначенных для расчета разных видов биологической активности. Затем необходимо с использованием всех этих моделей провести расчет разных видов биологической активности, для указанных преподавателем соединений.

Лабораторная работа № 5. Молекулярный докинг уридина и его производных в активный центр макромолекулы с кодом 4oqm.

От студентов требуется ознакомиться с интерфейсом программ AutoDock 4.2, AutoDock Tools и выполнить молекулярный докинг указанных преподавателем производных уридина в активный центр макромолекулы с кодом 4oqm:

Критерии оценки лабораторных работ

«5» (отлично): Задание по работе выполнено в полном объеме. Студент точно ответил на контрольные вопросы, свободно ориентируется в предложенном решении, может его

модифицировать при изменении условия задачи. Отчет выполнен аккуратно и в соответствии с предъявляемыми требованиями.

«4» (хорошо): Задание по работе выполнено в полном объеме. Студент ответил на теоретические вопросы, испытывая небольшие затруднения. Качество оформления отчета к работе не полностью соответствует требованиям.

«3» (удовлетворительно): Студент правильно выполнил задание к работе. Составил отчет в установленной форме, представил решения большинства заданий, предусмотренных в работе. Студент не может полностью объяснить полученные результаты.

«2» (неудовлетворительно): Студент неправильно выполнил от 70% до 50% заданий работы и не может объяснить полученные результаты.

Тестирование

- 1) Какой из методов молекулярного моделирования, базирующийся на законах классической механики, позволяет во времени отследить за эволюцией системы, состоящей из набора атомов:
А) молекулярная динамика;
Б) хемоинформатика;
В) молекулярный докинг;
Г) квантовая химия.
- 2) Выберите разделы, не относящиеся к области теоретической химии:
А) термодинамика;
Б) теоретическая химическая кинетика;
В) математическая химия;
Г) молекулярная динамика;
Д) квантовая химия;
Е) хемоинформатика.
- 3) Укажите расчетный метод определения геометрических характеристик и энергии молекул, основанный на эмпирических данных, лежит в основе функционирования нековалентного молекулярного докинга:
А) математическая химия;
Б) молекулярная динамика;
В) квантовая химия;
Г) молекулярная механика;
Д) теоретическая физическая химия.
- 4) Выберите формулу, по которой осуществляется расчет энергии деформации связей в молекулярной механике:
А) $E_{\text{св}} = \frac{1}{2} k_r (r - r_e)^2$;
Б) $E_{\text{св}} = \frac{3}{2} k_r (r - r_e)^2$;
В) $E_{\text{св}} = k_r \cdot (3n - 6) \cdot (r - r_e)^2$;
Г) $E_{\text{св}} = k_r (r - r_e)^2$
- 5) Выберите формулу, по которой осуществляется расчет деформации валентного угла в методе молекулярной механики:

$$A) E_{\text{вал}} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_e)^2;$$

$$Б) E_{\text{вал}} = \frac{3}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_e)^2;$$

$$B) E_{\text{вал}} = \frac{3}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_e)^{3/2};$$

$$Г) E_{\text{вал}} = \frac{1}{2} k_{\theta} \cdot (3n - 6) \cdot (\theta - \theta_e)^2$$

Критерии и методика оценивания результатов тестирования:

«5» (отлично): Тест решен в полном объеме. Студент правильно ответил как минимум на 80% вопросов.

«4» (хорошо): Тест решен в полном объеме. Студент правильно ответил на 60-79% всех вопросов

«3» (удовлетворительно): Допускается решение теста не в полном объеме. Студент правильно ответил на 45-59-79% всех вопросов.

«2» Допускается решение теста не в полном объеме. Студент не правильно ответил на 56% всех вопросов.

Пример контрольной работы

Задачи: даны наборы экспериментальных данных

Номер варианта Номерация данных	Вариант 1	Вариант 2	Вариант 3	Вариант 4	Вариант 5
1	0.741	0.709	0.917	0.849	0.629
2	-0.132	-0.055	-0.169	-0.148	-0.062
3	0.157	0.185	0.248	0.251	0.069
4	-0.656	-0.644	-0.670	-0.676	-0.611
5	-0.132	-0.089	0.031	0.039	-0.205
6	0.016	0.007	0.086	0.125	-0.055
7	0.474	0.473	0.530	0.489	0.412
8	0.254	0.245	0.260	0.251	0.355
9	0.129	0.147	0.071	0.095	0.173
10	-0.418	-0.406	-0.465	-0.486	-0.387
11	-0.508	-0.515	-0.477	-0.463	-0.527
12	-0.329	-0.331	-0.340	-0.281	-0.311
13	0.295	0.314	0.171	0.187	0.401
14	0.403	0.340	0.465	0.518	0.313
15	0.253	0.251	0.268	0.198	0.250
16	-0.075	-0.143	0.048	-0.039	-0.306
17	-0.310	-0.384	-0.187	-0.192	-0.632
18	-0.195	-0.191	-0.191	-0.156	-0.183
19	-0.117	-0.117	-0.153	-0.196	-0.108
20	0.001	-0.025	0.079	0.023	-0.091
21	-0.912	-0.916	-0.886	-0.950	-0.889
22	0.562	0.560	0.588	0.549	0.597

23	0.249	0.294	0.145	0.161	0.417
24	0.098	0.139	0.001	0.003	0.329
25	0.518	0.513	0.694	0.719	0.455
26	0.827	0.858	0.781	0.859	0.916
27	0.267	0.273	0.390	0.437	0.286
28	0.102	0.083	0.061	0.105	0.109
29	0.164	0.179	0.220	0.205	0.085
30	-0.730	-0.736	-0.746	-0.624	-0.727
31	0.260	0.232	0.227	0.267	0.232
32	0.199	0.164	0.305	0.346	0.132
33	-0.984	-0.945	-0.696	-0.818	-0.986
34	1.545	1.565	1.447	1.445	1.691
35	0.890	0.891	0.490	0.460	1.049
36	0.690	0.692	0.713	0.719	0.520
37	-0.533	-0.539	-0.630	-0.590	-0.708
38	-0.262	-0.255	-0.352	-0.382	-0.209
39	-0.214	-0.192	-0.347	-0.469	-0.119
40	-0.076	-0.061	-0.180	-0.211	-0.018
41	-0.065	-0.086	-0.054	-0.115	-0.035
42	-0.703	-0.689	-0.976	-0.948	-0.521
43	0.230	0.233	0.250	0.254	0.250
44	0.392	0.405	0.512	0.509	0.329
45	-0.485	-0.446	-0.506	-0.539	-0.389
46	-1.019	-1.026	-0.997	-1.091	-0.949
47	-0.748	-0.721	-0.608	-0.710	-0.790
48	-1.550	-1.521	-1.579	-1.595	-1.667
49	0.352	0.366	0.341	0.366	0.319
50	0.394	0.339	0.603	0.598	0.192

Задания:

1. Оцените размер выборки.
2. Вычислите выборочное среднее (то есть центроид набора).
3. Проведите центрирование данных. Для этого найдите разность между исходными числами и их центроидом.
4. Рассчитайте среднее квадратическое отклонение S.D. с учетом всего набора данных (стандартное отклонение на основании несмещённой оценки дисперсии).
5. На основании результатов, полученных в пунктах 2, 3 и 4 проведите нормировку данных.
6. Выявите промахи методом 3σ с доверительной вероятностью 95%.
7. В случае обнаружения промахов, удалите их и повторите пункты 1-5 для новой выборки данных.

Примечание:

Для нахождения промахов воспользуйтесь методом 3σ . При этом предположите, что $\sigma=S.D.$

$$10 \quad \Delta V_1 = V_{cp} - V_{min} < 3 \cdot \sigma;$$

$$11 \quad \Delta V_2 = V_{max} - V_{cp} < 3 \cdot \sigma;$$

- Критерии и методика оценивания результатов контрольных работ

«5» (отлично) выставляется студенту, если работа выполнена в полном объеме и изложена грамотным языком в определенной логической последовательности с точным использованием специализированной терминологии; показано уверенное владение нормативной базой;

«4» (хорошо) выставляется студенту, если работа выполнена в полном объеме, но имеет один из недостатков:

в работе допущены один-два недочета при освещении основного содержания ответа; нет определенной логической последовательности, неточно используется

специализированная терминология;

«3» (удовлетворительно) выставляется студенту, если работа выполнена неполно, не показано общее понимание вопроса, имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, при знании теоретического материала выявлена недостаточная сформированность основных умений и навыков.

«2» (неудовлетворительно) выставляется студенту, если студент выполнил контрольную работу менее чем на 50 %.

Примерная тематика рефератов

1. Роль методов математического моделирования в разработке лекарств с требуемым комплексом фармакологических свойств.
2. История развития концепции биоизостеризма.
3. Молекулярный граф как модель структуры органических и неорганических соединений.
4. Способы представления молекулярных структур в математическом моделировании.
5. Способы описания физико-химических свойств в математическом моделировании.
6. Практические аспекты методов теории распознавания образов.
7. Области применения идеологии нейросетевого моделирования.
8. Применение нейросетевых алгоритмов для поиска зависимостей «структура-свойство».
9. Метод Ханша. Практические приложения.
10. Современные [статистические методы](#) исследования зависимости между структурой и биологической активностью веществ.
11. Регрессионный анализ в анализе экспериментальных данных.
12. Сравнительный анализ методов CoMFA и CoMSIA.
13. Метод анализа топологии молекулярного поля (MFTA) в изучении взаимосвязи между структурой и активностью веществ.
14. Практические приложения метода силовых полей.
15. Идеология и практическая реализация информационной системы PASS.
16. Исследование взаимосвязи «структура – свойство» с использованием компьютерной системы SARD.
17. Информационная технология прогноза свойств органических соединений «Микрокосм». Возможности технологии и практические приложения.
18. Практические аспекты докинга.
19. Краткая характеристика компьютерных программных пакетов, реализующие возможности жесткого и гибкого докинга.
20. Молекулярный докинг в программном пакете AutoDock.
21. Молекулярный докинг в программном пакете Dock 6.5.
22. Молекулярная динамика: от углеводов - к белкам и пептидам.
23. Молекулярная динамика белков в программном пакете NAMD.

Критерии оценки рефератов:

Написание реферата следует начать с изложения плана темы, который как минимум включает 3 пункта. План должен быть логично изложен и должен включать в себя введение и заключение.

Реферат завершается списком использованной литературы.

Задачи студента при написании реферата заключаются в следующем:

1. логично и по существу изложить вопросы плана;

2. четко сформировать мысли, последовательно и ясно изложить материал, правильно использовать термины и понятия;
3. показать умение применять теоретические знания на практике;
4. показать знание материала, рекомендованного по теме;
5. использовать для экономического обоснования необходимый статистический материал.

Реферат оценивается преподавателем кафедры по следующим критериям.

Объем реферата должен быть не менее 12-18 стр. машинописного текста (аналог – компьютерный текст Time New Roman, размер шрифта 14 через полтора интервала), включая титульный лист.

Оценка 5 ставится, если выполнены все требования к написанию и защите реферата: обозначена проблема и обоснована её актуальность, сделан краткий анализ различных точек зрения на рассматриваемую проблему и логично изложена собственная позиция, сформулированы выводы, тема раскрыта полностью, выдержан объём, соблюдены требования к внешнему оформлению, даны правильные ответы на дополнительные вопросы.

Оценка 4 – основные требования к реферату и его защите выполнены, но при этом допущены недочёты. В частности, имеются неточности в изложении материала; отсутствует логическая последовательность в суждениях; не выдержан объём реферата; имеются упущения в оформлении; на дополнительные вопросы при защите даны неполные ответы.

Оценка 3 – имеются существенные отступления от требований к реферированию. В частности: тема освещена лишь частично; допущены фактические ошибки в содержании реферата или при ответе на дополнительные вопросы; во время защиты отсутствует вывод.

Оценка 2 – тема реферата не раскрыта, обнаруживается существенное непонимание проблемы.

Критерии оценивания докладов

Критерий	Оценка			
	2	3	4	5
Качество доклада	Доклад зачитывает	Доклад рассказывает, но не объяснена суть работы	Чётко выстроен доклад, владеет иллюстративным материалом	Доклад производит выдающееся впечатление
Качество ответов на вопросы	Не может ответить ни на один вопрос	Не может чётко ответить на вопросы	Не может ответить на большинство вопросов	Отвечает на большинство вопросов
Использование демонстрационного материала	Демонстрационный материал отсутствует	Представленный демонстрационный материал не использовался докладчиком	Демонстрационный материал использовался в докладе	Автор предоставил демонстрационный материал и прекрасно в нём ориентировался
Оформление демонстрационного материала	Демонстрационный материал отсутствует	Представлен плохо оформленный демонстрационный материал	Демонстрационный материал хорошо оформлен, но есть неточности	К демонстрационному материалу нет претензий
. Владение автором научным и специальным аппаратом	Автор слабо владеет базовым аппаратом	Автор владеет базовым аппаратом	Использованы общенаучные и специальные термины	Показано владение специальным аппаратом
Чёткость выводов, обобщающих доклад	Автор не сделал выводов	Выводы имеются, но они не доказаны	Выводы нечёткие	Выводы полностью характеризуют

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

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

Основная литература:

1. В.Р. Хайруллина. Введение в вычислительную химию: курс лекций. Уфа: РИЦ БашГУ, 2018. 228 с.
<http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+4456+default+7+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>.
2. В.Р. Хайруллина, Э.М. Хамитов. Практикум по вычислительной химии: учебное пособие. Ч. I. Уфа: РИЦ БашГУ, 2017. 160 с. Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ»: URL:https://elib.bashedu.ru/dl/read/Hajrullina_Hamitova_Praktikum_po_vychislitelnoj_himii_Ch_1_up_2017.pdf
3. Марков, Ю.Г. Математические модели химических реакций [Электронный ресурс] : учебник / Ю.Г. Марков, И.В. Маркова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2013. — 192 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/40052>.
4. В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам. – Кемерово : КемГУ, 2012. 56 с. Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Университетская библиотека online»: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=232678&sr=1.
5. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/92941>.
6. Джеймс, Г. Введение в статистическое обучение с примерами на языке R [Электронный ресурс] / Г. Джеймс, Д. Уиттон, Т. Хасты, Р. Тибширани ; пер. с англ. Мاستицкого С.Э.. — Электрон. дан. — Москва : ДМК Пресс, 2017. — 456 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/93580>. — Загл. с экрана.
7. Рашка, С. Python и машинное обучение: крайне необходимое пособие по новейшей предсказательной аналитике, обязательное для более глубокого понимания методологии машинного обучения [Электронный ресурс] : руководство / С. Рашка ; пер. с англ. Логунова А.В.. — Электрон. дан. — Москва : ДМК Пресс, 2017. — 418 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/100905>. — Загл. с экрана.
8. Эрик, Р. Семь баз данных за семь недель. Введение в современные базы данных и идеологию NoSQL [Электронный ресурс] / Р. Эрик, Р.У. Джим. ; под ред. Ж. Картер ; пер. с англ. Слинкин А.А.. — Электрон. дан. — Москва : ДМК Пресс, 2013. — 384 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/58690>. — Загл. с экрана.

Дополнительная литература:

9. Биометаллоорганическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие / под ред. Жауэна Ж. ; пер. с англ. В.П. Дядченкр, К.В.Зайцева. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 505 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/66354>. — Загл. с экрана.
10. Гамаюрова, В.С. Ферменты [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.С. Гамаюрова, М.Е. Зиновьева. — Электрон. дан. — Казань : КНИТУ, 2010. — 278 с. — Доступ к тексту

- электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/13347>. — Загл. с экрана.
11. Малкова, О.В. Основы биохимии [Электронный ресурс] : учебное пособие / О.В. Малкова, О.А. Петров, М.Е. Клюева. — Электрон. дан. — Иваново : ИГХТУ, 2009. — 48 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/4508>. — Загл. с экрана.
 12. Гаврилова, Т.А. Инженерия знаний. Модели и методы [Электронный ресурс] : 2018-07-12 / Т.А. Гаврилова, Д.В. Кудрявцев, Д.И. Муромцев. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 324 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/107925>. — Загл. с экрана.
 13. Матюшкин, И.В. Моделирование и визуализация средствами MATLAB физики наноструктур [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / И.В. Матюшкин. — Электрон. дан. — Москва : Техносфера, 2011. — 168 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/73025>. — Загл. с экрана.
 14. Син, Т. Занимательная статистика. Регрессионный анализ. Манга [Электронный ресурс] / Т. Син. — Электрон. дан. — Москва : ДМК Пресс, 2014. — 214 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/90123>. — Загл. с экрана.
 15. Воскобойников, Ю.Е. Регрессионный анализ данных в пакете MATHCAD [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ю.Е. Воскобойников. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 224 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/666>. — Загл. с экрана.
 16. Ю.И. Бродский. Лекции по математическому и имитационному моделированию Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2015. 240 с. Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=429702&sr=1.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - [elibrary.ru](https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp) (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License.
11. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU.

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

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
<p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус)</p> <p>2. учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа: лаборатория № 101 (химфак корпус), лаборатория № 120 (химфак корпус)</p> <p>3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p>4. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория №</p>	<p style="text-align: center;">Аудитория № 405</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 311</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 310</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 305</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;">Лаборатория № 101</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, аквадистиллятор ДЭ-4, кондуктометры, модуль “Термостат”, модуль “Универсальный контроллер”, холодильник ATLANT MXM 2835-90, поляриметр круговой СМ-3, термостаты -3 шт., сесы аналитические Ohaus PA-64 С (65 г/0,0001 г), кондуктометр АНИОН 7020, весы технические, персональный компьютер Pentium 4, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц, кювета 100мм для поляриметра СМ-3 – 3 шт.</p> <p style="text-align: center;">Лаборатория № 120</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, термостаты – 2шт., модуль “Электрохимия”, модуль “Универсальный контроллер”, модуль “Термохимический анализ”, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"СQ 100 ei (моноблок)</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 001</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 002</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 006</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 007</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Аудитория № 008</p> <p>Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал № 1</p> <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал №2</p> <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт.,</p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №32110574235 от 13.09.2021 г. Срок действия лицензии до 10.10.2022</p>

<p>405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус), аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p> <p>5. помещения для самостоятельной работы: читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал №2 (физмат корпус-учебное), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (учебный корпус), читальный зал № 7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (химфак корпус)</p> <p>6. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория № 416 (химфак корпус).</p>	<p>неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p>Читальный зал № 5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p>Читальный зал № 6 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p>Читальный зал № 7 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p>Аудитория № 004 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Аудитория № 005 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPO Neos 470 MDi5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSt450/ SKS1/SSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Лаборатория № 418 Учебная мебель, факсимильным аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5K(0,5кВТ; 2А,220/0-250В),3604, 99р Т.207/2-15, весы "Ohaus" PA64C (65г, 0,1мг) с поверкой, весы VIC-1500d1 (1500г. 100МГ, внешн.калибровка) ACCULAB, иономер И-160МИ с поверкой, комплекс вольтамперометрический СТА, компьютер в комплекте DEPO Neos 4601\Ю/монитор 20" Samsung BX2035/клав./мышь, компьютер персональный №1 т.210-14/3, магнитная мешалка без нагрева Tolopino – 2шт, магнитная мешалка с нагревом и нанокерамич.поверх hG-MAG HS, метр-рН рН-150МИ (с гос.поверкой), монитор 19" LG L1919S BF Black (LCD<TFT,8ms, 1280*1024,250КД/М.1 400:1,4:3 D-Sub), персональный компьютер в составе с/блок/Core J7-4770 (3.4)/H87/SYGA/HDD 500Gb, монитор ЖК"20"Веpl.клавиат ура+мышь, принтер Canon i-SENSYS MF3010, рН-метр рН-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIP LF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p> <p>Лаборатория № 416 Атомно-абсорбционный спектрофотометр модель AA-7000, фирмы "Шимадзу", Япония, баллон с гелием марки А – 2 шт, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц/*1/, газовый хромато-масс-спектрометр модель GCMS-QP 2010PIUS, компьютер в составе: системный блок, монитор, клавиатура, мышь, кондиционер QUATTROCUMA QV/QN-F12WA, ноутбук Fujitsu Lifebook F530 Intel Core i3-330M/4Gb/500Gb/ DVD-RW/BT/15.6"/Wi n7НВ+Office, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"CQ 100 eu (моноблок), электроплитка Irit IR-8200,1500Вт диаметр конфорки 185мм.</p>	
--	---	--

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины «Теоретические методы исследования биологической активности соединений» на 1 семестр

очная форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	2/72
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	43,2
лекций	18
практических/ семинарских	-
лабораторных	24
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	1,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	3
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	25,8

Форма(ы) контроля:

Экзамен в 1 семестре

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СРС			
1	<p>Краткое описание основных подходов и методов для теоретического исследования биологической активности молекул.</p> <p>Возможности теоретических методов установления закономерностей в строении и свойствах химических соединений, их место и значимость в современной физической химии, перспективы этих подходов при целенаправленном поиске соединений с требуемым комплексом физико-химических свойств.</p>	2		2		[1-5, 12, 15]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
2	<p>Концепция биоизостеризма.</p> <p>Понятие биоизостера. История развития концепции биоизостеризма. Группы изостеров по Ленгмюру. Закон гидридного замещения Г. Грима. Изостеры по Г. Эрленмейеру. Классические и неклассические биоизостеры. Примеры..</p>	1		2		[1-2, 7, 12]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
3	<p>Способы представления структуры химических соединений. Понятие дескриптора. Типы дескрипторов. Различные классификации дескрипторов по полноте и способам описания межмолекулярных взаимодействий. Информационное содержание дескрипторов молекулярной структуры. Электронные (электрические), стерические и межмолекулярные дескрипторы. Основные группы дескрипторов в соответствии с классификацией О.А. Раевского. Способы классификации дескрипторов. Информационное содержание дескрипторов молекулярной структуры</p> <p>Дескрипторы элементарного уровня; дескрипторы электронной структуры, дескрипторы межмолекулярных взаимодействий. «Вложенность» дескрипторов. Дескрипторы элементного уровня.</p>	2		2		[1-2, 5]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа

	<p>Дескрипторы структурной формулы. Топологические индексы (дескрипторы). Понятие молекулярного графа. Матрица смежности и матрица расстояний. Матрицы связей. Примеры кодирования структуры в виде матрицы связей.</p> <p>Топологические дескрипторы, оцениваемые на основе матрицы связности: индекс связности Рандича $\chi(G)$, количественный учет взаимного влияния атомов, индекс Винера $W(G)$, каппа-индексы.</p> <p>Субструктурные дескрипторы. Определение. Функции субструктурных дескрипторов. Дескрипторы электронной структуры молекул: заряды на атомах, энергии высшей занятой (E_{HOMO}) и низшей незанятой (E_{LUMO}) молекулярных орбиталей, дипольный момент.</p> <p>Геометрические дескрипторы (дескрипторы молекулярной формы). Методы оценки дескрипторов молекулярной формы: метод дистанционной геометрии, модель связывающей стороны, анализ молекулярной формы, гипотетическая решетка активной стороны, анализ молекулярной формы. Дескрипторы межмолекулярных взаимодействий. Дескрипторы реакционной способности. Параметры гидрофобности, электронные параметры. Описание электростатических взаимодействий. Стерические параметры. Потенциал Леннарда – Джонса</p> <p>Индикаторные переменные (параметры). Примеры их использования для установления взаимосвязи между структурой и свойствами соединений.</p>							
4	<p>Теоретические основы регрессионного анализа. Множественный корреляционный коэффициент. Критерий Фишера. F-статистика, «объясненная дисперсия» PLS-анализ. Условия применимости регрессионного анализа для обработки экспериментальных данных</p>	1		4	3	[1, 9]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
5	<p>Методы количественного изучения взаимосвязи «структура – свойство». Общее представление о методах установления количественных соотношений «структура – свойство» (КССА). Дескрипторы, используемые для исследования КССА. Методология КССА, способы представления структурных формул веществ. Компьютерное моделирование лекарственных препаратов. Текущее состояние и перспективы</p>	2		4		[1-2, 6-8, 12-16]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная

	<p>развития КССА в России.</p> <p>Метод Ханша (соотношения линейности свободной энергии) и метод Фри-Вильсона. Метод Ханша: соотношения линейности свободной энергии. Основное содержание этого метода. Вид функциональных зависимостей между структурой и биологической активностью. Применение установления КССА на конкретном примере пара-, метазамещенных производных N, N-диметил-α-бромфениламинов, проявляющих антиадренергические свойства. Преимущества и недостатки метода.</p> <p>Метод Фри-Вильсона. Суть метода. Способы представления структурных формул веществ, аналитический вид функциональных зависимостей между структурой и активностью. Достоинства и недостатки модели. Примеры использования для решения практических задач.</p> <p>Модифицированный вариант Каммараты. Объединенное соотношение Фри-Вильсона и Ханша.</p>						работы, подготовка к экзамену	работа
6	<p>Методы, ориентированные на топологические различия молекул.</p> <p>Понятие суперструктуры для анализа количественной связи между структурой и активностью органических соединений. Метод возмущения ограниченного концентрического упорядоченного окружения (Метод DARC/PELCO). Суть метода, понятие следа популяции. Дескрипторы, используемые для описания связи между структурой и свойствами молекул. Примеры использования метода, его достоинства и недостатки.</p> <p>Подход Менона и Каммараты. Описание структуры соединения. Процесс формирования наборов локальных дескрипторов. Достоинства и недостатки метода.</p> <p>Позиционный анализ Ф. Маги. Построение гипермолекулы. Возможности, основные преимущества и недостатки метода.</p>	1		2		[1-2]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
7	<p>Современные компьютерные программы для расчетов КССА.</p> <p>Методы, опирающиеся на трехмерную модель структуры, их суть. Методы, ориентированные на данные о пространственном расположении атомов (топологические подходы). Их достоинства и недостатки.</p> <p>Генерирование 3D-структур лигандов. Метод силовых полей, его суть метода силовых полей. Описание связывающих и несвязывающих взаимодействий. Расчет общей энергии.</p> <p>Конформационный анализ лигандов. Выбор передовых структур. Поиск рецепторсвязывающей (передовой) конформации. Принципа «активность – аналогия».</p>	3	–	4		[1-2, 13]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа

	<p>Решеточная модель энергетического пространства.</p> <p>Сравнительного анализа молекулярного поля (CoMFA). Суть метода, структура исследований методом CoMFA. Понятие пробного атома. Расчет стерических (Ван-дер-ваальсовых) и электростатических (кулоновских) взаимодействий между рассматриваемым соединением и пробным атомом. Достоинства и недостатки метода.</p> <p>Сравнительный анализ индексов молекулярного подобия (CoMSIA). Оценка меры подобия атомов в молекуле. Расчет индексов подобия для физико-химических свойств. Корреляционные зависимости между значениями дескрипторов и биологической активностью. Применение этих уравнений для решения обратной задачи. Основные преимущества метода по сравнению с CoMFA.</p>							
8	<p>Биологические нейронные сети. Искусственные нейронные сети (ИНС).</p> <p>Понятие «искусственные нейронные сети (ИНС)». Задачи, решаемые с использованием ИНС. Краткий исторический обзор возникновения теории ИНС, аналогия биологическими нейронными сетями. Основные понятия.</p> <p>Модель технического нейрона. Элементы ИНС. Архитектура ИНС. Обучение ИНС.</p> <p>Многослойные сети прямого распространения. Достоинства и недостатки метода ИНС. Сравнение нейросетевого алгоритма со стандартными статистическими методами. Применение нейросетевых алгоритмов для поиска зависимостей «структура-свойство».</p>	2	–	–		[2, 8]		<p>кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа</p>
9	<p>Перспективы применения методов теории распознавания образов (ТРО) для прикладных и фундаментальных научных исследований.</p> <p>Основные понятия методов ТРО. Отбор признаков. Процедура распознавания структур соединений. Предварительная обработка исходных данных. Масштабирование и нормализация, преобразования кластеризации, отбор признаков. Априорный и апостериорный отбор признаков. Алгоритм расчета прогнозирующей способности отдельных признаков.</p> <p>Обучение «с учителем» и «без учителя». Цели и задачи процедуры классификации объектов. Метод опорных векторов. Его суть. Метод ближайшего соседа, основные достоинства и недостатки.</p> <p>Байесовская классификация. Понятие «наивной классификации», ее свойства. Достоинства и недостатки байесовских сетей. Кластерный анализ.</p>	2	–	–		[1-2, 6, 14-16]	<p>Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену</p>	<p>кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа</p>

10	<p>Компьютерные системы, реализующие методы ТРО. Компьютерная система PASS. Методология и принципы работы программы PASS. Назначение системы PASS. Важнейшие требования к прогнозу биологической активности химических соединений. Основные составляющие элементы системы. Представление биологической активности. Описание химической структуры. Понятие MNA-дескрипторов. База данных и знаний SAR base. Алгоритм прогноза биологической активности. Классический байесовский подход. Основные уравнения для расчета вероятности проявления целевого свойства. Процедура обучения. Интерпретация результатов прогноза PASS. Применение прогноза спектров биологической активности органических соединений.</p> <p>Компьютерная система исследования связи «структура – свойство» SARD-21. Основные процедуры и блоки системы SARD-21. Описание аналитического блока. Формирование исследуемых массивов структур. Представление структуры химического соединения на языке фрагментарных дескрипторов. Оценка информативности всех типов признаков. Формирование математической модели распознавания и прогноза. Описание блока конструирования. Выбор базовых структур для модификации. Определение элементов строения, наиболее благоприятных для последующего дизайна. Краткая история создания информационной технологии прогноза свойств органических соединений «Микрокосм». Описание информационной технологии компьютерного прогноза свойств органических соединений «Микрокосм». Теоретические основы информационной технологии «Микрокосм». Концепция. Обучающие выборки. Описание структуры соединений. Типы используемых дескрипторов. Методы прогноза биологической активности в рамках данной системы. Стратегии прогноза активности. Примеры экспериментальных исследований, иллюстрирующие возможности информационной технологии прогноза свойств органических соединений «Микрокосм».</p>	2	-			[1-2, 6-8, 12-16]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	кейс-задача; лабораторные работы; рефераты; доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа
11	<p>Докинг и рациональный дизайн веществ – ингибиторов ферментов и протеинов. Идеология метода и варианты. Алгоритмы докинга. Приложение к поиску эффективных ингибиторов различных</p>							кейс-задача; лабораторные работы; рефераты;

	<p>ферментов. Описание идеологии разработки новых лекарственных средств в современном мире. Решение практических задач с использованием программы AutoDock. Молекулярная динамика. Основные понятия и базовые принципы молекулярной динамики, ее цели и задачи в молекулярном моделировании. Термостаты в молекулярной динамике. Решение практических задач с использованием программы NAMD.</p>	2	–	4		[1-2, 6-8, 12-16]		<p>доклады; комплект типовых задач; тест, контрольная работа</p>
	Всего часов:	18	–	24	3			