

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ЛГПУ»)

Факультет естественных наук
Кафедра химии и биохимии



УТВЕРЖДАЮ

Врио декана факультета
естественных наук

М.В. Воронов

«16» декабря 2023 г.

Приложение к рабочей программе учебной дисциплины

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации
обучающихся по дисциплине

Моделирование лекарственных препаратов

По направлению подготовки 04.03.01 Химия
Профиль подготовки Медицинская и фармацевтическая химия
Квалификация выпускника бакалавр
Форма обучения очная
Курс 4, семестр 7

Разработчики
доцент кафедры химии и биохимии
ФГБОУ ВО «ЛГПУ»
Сараева Т.А.
ассистент кафедры химии и биохимии
Барышев Б.Н.
Заведующий кафедрой
химии и биохимии

 В.Д. Дяченко

Протокол

от «07» декабря 2023 г. № 6

Луганск, 2023

1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

1.1. Область применения

Фонд оценочных средств (ФОС) – неотъемлемая часть рабочей программы дисциплины (модуля) «Моделирование лекарственных препаратов» и предназначен для контроля и оценки образовательных достижений студентов, освоивших программу дисциплины (модуля).

1.2. Цели и задачи фонда оценочных средств

Цель ФОС – установить соответствие уровня подготовки обучающегося требованиям ФГОС ВО бакалавриат по направлению подготовки 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки), утвержденным приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 22 февраля 2018 г. № 125 (с изменениями и дополнениями).

1.3. Перечень компетенций, формируемых в процессе освоения основной образовательной программы

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций и индикаторов их достижения:

Код по ФГОС ВО	Индикатор достижения
Профессиональные	
ОПК-3 – способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1 – Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

1.4. Этапы формирования компетенций и средства оценивания уровня их сформированности

Этапы формирования компетенций	Компетенции	Контрольно-оценочные средства / способ оценивания
Тема 1. Введение в дисциплину.	ОПК-3	Устный опрос, защита лабораторных работ, проверка самостоятельной работы
Тема 2. Алгоритм создания лекарственного препарата	ОПК-3	Устный опрос, защита лабораторных работ, проверка самостоятельной работы
Тема 3. Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов	ОПК-3	Устный опрос, защита лабораторных работ, проверка самостоятельной работы
Тема 4. Алгоритм виртуального скрининга химических соединений	ОПК-3	Устный опрос, защита лабораторных работ, проверка самостоятельной работы
Тема 5. Виртуальный скрининг, основанный на структуре	ОПК-3	Устный опрос, защита лабораторных работ, проверка

биомолекулы.		самостоятельной работы
Тема 6. Метод докинга.	ОПК-3	Устный опрос, защита лабораторных работ, проверка самостоятельной работы
Тема 7. Использование обратного QSAR для создания соединений	ОПК-3	Устный опрос, защита лабораторных работ, проверка самостоятельной работы
Текущая аттестация	ОПК-3	Устный опрос, защита лабораторных работ, проверка самостоятельной работы
Промежуточная аттестация	ОПК-3	Экзамен

1.5. Описание показателей формирования компетенций

Код компетенции	Результаты сформированности
ОПК-3	<p>Знает: об основных классах органических соединений; понимает природу взаимодействия функциональных групп внутри молекулы, а также межмолекулярные взаимодействия вида «группа-рецептор»; осведомлён об основных техниках и подходах к молекулярному моделированию;</p> <p>Умеет: логически мыслить, классифицировать и систематизировать данные; способен к самостоятельной работе и работе с литературой;</p> <p>Владеет навыками: саморефлексии, способствующими осмыслению целей и задач своей профессиональной подготовки, методами молекулярного моделирования биополимеров и лекарственных веществ, навыками фармакофорного поиска, основными методами 3D-QSAR и программными средствами прогнозирования биологической активности, навыками создания лекарственных средств.</p>

1.6. Критерии оценивания компетенций на разных этапах их формирования

Вид учебной работы	Количество баллов
	ОФО
1 семестр	
Защита лабораторных работ	40
Самостоятельная работа (проверка конспектов)	20
Письменный зачет	40
2 семестр	
Защита лабораторных работ	40
Самостоятельная работа (проверка конспектов)	20
Письменный экзамен	40
Всего	200

Накопительная система оценивания по 100-балльной шкале

Четырехбалльная система оценивания	100-балльная шкала	Буквенная шкала, соответствующая 100-балльной шкале	Система оценивания
------------------------------------	--------------------	---	--------------------

экзамена			зачета
Отлично	90-100	А – отлично – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному	Зачтено
Хорошо	83-89	В – очень хорошо – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения большинства из них оценено числом баллов, близким к максимальному	
Хорошо	75-82	С – хорошо – теоретическое содержание курса освоено полностью; некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения ни одного из них не оценено минимальным числом баллов, некоторые виды заданий выполнены с ошибками	
Удовлетворительно	63-74	Д – удовлетворительно – теоретическое содержание курса освоено частично, но пробелы не носят существенного характера; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы; большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий выполнено, некоторые из выполненных заданий содержат ошибки	
Удовлетворительно	50-62	Е – посредственно – теоретическое содержание курса освоено частично; некоторые практические навыки работы не сформированы, многие предусмотренные учебной программой обучения учебные задания не выполнены либо качество выполненных некоторых из них оценено числом баллов, близким к минимальному	
Неудовлетворительно	21-49	FX – неудовлетворительно – теоретическое содержание курса освоено частично; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом не сформированы; большинство предусмотренных учебной программой обучения учебных заданий не выполнено либо качество их выполнения оценено числом баллов, близким к минимальному; при дополнительно самостоятельной работе над материалом курса возможно повышение качества выполнения учебных заданий	Не зачтено
Неудовлетворительно	0-20	F – неудовлетворительно – теоретическое содержание курса не освоено; необходимые практические навыки работы не сформированы; все выполненные	

		учебные задания содержат грубые ошибки; дополнительная самостоятельная работа над материалом курса не приведет к какому-либо значимому повышению качества выполнения учебных заданий	
--	--	--	--

2. КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

2.1. Оценочные средства текущего контроля

Вопросы для текущего контроля

1. Типичный алгоритм создания лекарственных препаратов
2. Требования к лекарственным препаратам
3. Цели оптимизации структуры и способы оптимизации структуры
4. Обнаружение и оптимизация соединения-лидера
5. Создание фармакофора с использованием структуры биомишени
6. Проведение виртуального скрининга библиотеки соединений и обнаружение потенциальных соединений-хитов
7. Валидация и оптимизации метода проведения виртуального скрининга библиотеки соединений
8. Обнаружение потенциальных соединений-хитов

2.2. Оценочные средства для промежуточной аттестации

Вопросы к зачету

1. Основные этапы разработки, испытания и внедрения лекарственного препарата.
2. Требования к лекарствам. Типичные причины отклонения лекарственных препаратов на различных этапах разработки и испытаний.
3. Алгоритм создания лекарственного препарата. Практические и теоретические создание лекарственных препаратов.
4. Метод "золотой пули". Достоинства и недостатки подхода.
5. Биологический профайлинг соединений и его использование для создания лекарственных веществ.
6. Взаимодействие протеин-протеин и лекарство-лекарство. Способы осуществления данных взаимодействий.
7. Высокопроизводительный скрининг и его использование в создании лекарственных препаратов.
8. Комбинаторная химия. Отбор библиотек. Разбросанные и сфокусированные библиотеки. Способы отбора соединений для проведения скрининга.
9. Типичные фильтры в виртуальном скрининге.
10. Виртуальный скрининг, основанный на структуре лигандов.
11. Фармакофорный поиск с использованием структуры лиганда. Способы определения фармакофора.
12. Виртуальный скрининг, основанный на структуре биомолекулы. Основные подходы, используемые при таком типе скрининга.
13. Трехмерные фармакофоры и их использование для скрининга.
14. Докинг. Основные алгоритмы докинга.
15. Скоринг. Типы скоринг функций.
16. De novo дизайн лекарственных препаратов. Основные методы de novo дизайна.

17. Использование биоизостеризма химических групп для создания лекарственных препаратов.