



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
по дисциплине «Компьютерное моделирование свойств химических соединений»
Направление подготовки 04.03.01 – Химия
Профиль «Фундаментальная и прикладная химия
(совместно с ИХ ДВО РАН и ТИБОХ ДВО РАН)»
Форма подготовки очная

Владивосток
2023

Содержание

I. Перечень форм оценивания, применяемых на различных этапах формирования компетенций в ходе освоения дисциплины «Механизмы реакций и стереохимия».....	3
II. Текущая аттестация по дисциплине «Механизмы реакций и стереохимия».....	5
III. Промежуточная аттестация по дисциплине «Механизмы реакций и стереохимия».....	10

I. Перечень форм оценивания, применяемых на различных этапах формирования компетенций в ходе освоения дисциплины «Компьютерное моделирование свойств химических соединений»

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций	Результаты обучения	Оценочные средства	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1.	Разделы 1-3	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч. с использованием патентных баз данных)	Знает правила проведения первичного поиска информации по заданной тематике научного исследования (в т.ч., с использованием патентных баз данных)	ПР-1	Вопросы на Зачет
			Умеет проводить первичный поиск информации по заданной тематике научного исследования (в т.ч., с использованием патентных баз данных)	тоже	Отчет о результатах исследований (ПР-9)
			Владеет навыками проведения первичного поиска информации по заданной тематике научного исследования (в т.ч., с использованием патентных баз данных)	ПР-9	Отчет о результатах исследований (ПР-9)
		ПК-5.1 Владеет навыками поиска необходимой	Знает методы поиска необходимой информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)	ПР-1	Вопросы на Зачет
			Умеет проводить поиск необходимой информации по теме научного	тоже	Отчет о результатах исследований (ПР-9)

	информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)	исследования в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)		
	информации в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)	Владеет навыками поиска необходимой информации по теме научного исследования в профессиональных базах данных (в т.ч., патентных)	ПР-9	Отчет о результатах исследований (ПР-9)
	ПК-5.2 Составляет обзор литературных источников по заданной теме, оформляет отчеты о выполненной работе по заданной форме	Знает правила составления обзора литературных источников по заданной теме научного исследования, оформления отчетов о выполненной работе по заданной форме и методы статистической обработки результатов	ПР-1	Вопросы на Зачет
		Умеет составлять обзор литературных источников по заданной теме научного исследования, оформлять отчеты о выполненной работе по заданной форме, проводить статистическую обработку полученных результатов	тоже	Отчет о результатах исследований (ПР-9)
		Владеет навыками составления обзора литературных источников по заданной теме научного исследования, оформления отчетов о выполненной работе по заданной форме, проведения статистической обработки результатов	ПР-9	Отчет о результатах исследований (ПР-9)

II. Текущая аттестация по дисциплине «Компьютерное моделирование свойств химических соединений»

Текущая аттестация студентов по дисциплине «Компьютерное моделирование свойств химических соединений» проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной.

Текущая аттестация по дисциплине «Компьютерное моделирование свойств химических соединений» проводится в форме контрольных мероприятий (тестирования) по оцениванию фактических результатов обучения студентов и осуществляется ведущим преподавателем.

По каждому объекту дается характеристика процедур оценивания в привязке к используемым оценочным средствам.

Оценочные средства для текущего контроля

1. Банк тестовых заданий (ПР-1):

Вариант 1

1. Терапевтической мишенью называют

- А) любую конформационно-подвижную биоструктуру, взаимодействующую с лекарственным средством и трансформирующую это взаимодействие в биологический ответ
- Б) любую конформационно-подвижную биоструктуру, обеспечивающую реализацию биологического ответа на молекулярном уровне
- В) только белковые молекулы, взаимодействующие с лекарственным средством и трансформирующие это взаимодействие в биологический ответ
- Г) молекулярные «органы чувств» клеток

2. Столько слагаемых входит в уравнение расчета полной энергии системы в методе молекулярной механики?

- А) три
- Б) четыре
- В) пять
- Г) шесть

3. Силы межатомного притяжения и отталкивания моделируются в методе молекулярной механики по закону

- А) Вант-Гоффа
- Б) Гука
- В) Ньютона
- Г) Леннарда-Джонса

4. Эффекты торсионных напряжений моделируются в методе молекулярной механики по закону

- А) линейному
- Б) степенному
- В) косинуса
- Г) логарифмическому

5. В основе первичной аминокислотой последовательности белка лежит

- А) гетерополимер, образованный остатками аминокислот, связанных пептидными связями
- Б) гомополимер, образованный остатками аминокислот, связанных пептидными связями

- В) гетерополимер, образованный остатками аминокислот, связанных макроэргическими связями
- Г) гетерополимер, образованный остатками аминокислот, связанных дисульфидными связями

6. Характеристики пептидной (амидной) связи включают

- А) Прочная, невозможность вращения по причине сопряжения
- Б) Прочная по причине сопряжения, но способная к свободному вращению
- В) Лабильная, легко разрушается при 40 ° С и выше
- Г) Лабильная, легко разрушается при 40 ° С и выше, но легко восстанавливается при снижении температуры

7. Применение данных рентгеноструктурного анализа применимо для построения моделей укладки белка, потому что

- А) экспериментально доказана идентичность укладки белка в физиологических условиях и при его кристаллизации
- Б) эти данные доступны широкому кругу пользователей
- В) это принципиально единственная возможность установить пространственную структуру молекул
- Г) сами принципы организации и самосборки белка исключают возможность его альтернативного сворачивания

8. Метод моделирования по гомологии позволяет

- А) получить пространственную модель исследуемого белка по прототипу, имеющему сходную аминокислотную последовательность
- Б) получить пространственную модель исследуемого белка по прототипу, имеющему сходную функцию
- В) получить пространственную модель исследуемого белка по прототипу - аналогичному белку из другого вида организмов
- Г) получить распределение элементов вторичной структуры исследуемого белка по прототипу, имеющему сходную аминокислотную последовательность

9. Точность расчета энергии связывания рецептор-лиганд в методах молекулярного докинга составляет около

- А) 1 ккал/моль
- Б) 2 ккал/моль
- В) 5 ккал/моль
- Г) 10 ккал/моль

10. Алгоритм Метрополиса основан на следующем

- А) после случайного расчета значения функции данное значение становится текущим, если оно меньше предыдущего или с вероятностью, которая с каждой итерацией убывает
- Б) после случайного расчета значения функции данное значение становится текущим, если оно больше предыдущего или с вероятностью, которая с каждой итерацией убывает
- В) после случайного расчета значения функции данное значение становится текущим, если оно меньше предыдущего или с вероятностью, которая с каждой итерацией возрастает
- Г) после случайного расчета значения функции данное значение становится текущим, если оно меньше предыдущего или с вероятностью, которая остается неизменной на протяжении всего расчета

Вариант 2

1. Терапевтическим индексом (ТИ) называют

- А) отношение терапевтической дозы ED_{50} к токсической дозе LD_{50}
- Б) отношение токсической дозы ED_{50} к терапевтической дозе LD_{50}
- В) отношение токсической дозы LD_{50} к терапевтической дозе ED_{50}
- Г) отношение терапевтической дозы LD_{50} к токсической дозе ED_{50}

2. «Силловые поля» характеризуются как

- А) набор констант из эмпирических данных для расчета слагаемых уравнения полной энергии молекулы
- Б) набор теоретически рассчитанных констант для расчета слагаемых уравнения полной энергии молекулы
- В) набор параметров ранее рассчитанных молекул, среди которых выбираются наиболее подходящие для расчета каждой конкретной молекулы
- Г) набор констант из эмпирических данных для расчета слагаемых уравнения движения молекулы

3. Электростатические взаимодействия описываются в методе молекулярной механики с помощью

- А) уравнений Максвелла
- Б) теоремы Гаусса
- В) закона Кулона
- Г) закона Ампера

4. Природа сил Ван-дер-Ваальса заключается в следующем

- А) отталкивание атомов друг от друга на близком расстоянии
- Б) притяжение атомом друг к другу за счет «гидрофобного эффекта»
- В) отталкивание атомов друг от друга за счет энтропийного фактора
- Г) притяжения атомов за счет эффекта согласованной поляризации

5. Выберите правильную характеристику природных аминокислот

- А) бета-аминокислоты, около 30, содержащие алифатические, ароматические, нейтральные, кислые и основные радикалы с асимметрическим центром
- Б) бета-аминокислоты, около 30, содержащие различные алифатические, ароматические, нейтральные, кислые и основные радикалы
- В) альфа-аминокислоты, около 20, содержащие различные алифатические, ароматические, нейтральные, кислые и основные радикалы, относятся к L-ряду
- Г) альфа-аминокислоты, около 20, содержащие различные алифатические, ароматические, нейтральные, кислые и основные радикалы, относятся к D-ряду

6. Уникальность свойств белка как вещества заключается в следующем

- А) может быть получен только в условиях клетки
- Б) обладает способностью катализировать химические превращения
- В) «жизнь – есть форма существования белковых тел»
- Г) имея гетерополимерную структуру, осуществляет самосборку структуры, проявляющей свойства псевдокристаллического тела.

7. Метод моделирования по гомологии применим, если степень совпадения аминокислотой последовательности с белком-прототипом не ниже

- А) 30
- Б) 50%
- В) 70%
- Г) 85%

8. При оценке применимости белка-прототипа при моделировании по гомологии необходимо, чтобы различия в последовательностях были

- А) сосредоточены в одной N-конца
- Б) распределены в виде серии блоков
- В) распределены равномерно
- Г) сосредоточены в области C-конца

9. При оценке эффективности связывания терапевтической мишени различными лигандами достоверны следующие различия констант связывания

- А) 6,5 нМ и 8,1 нМ
- Б) 100 нМ и 10 мкМ
- В) 1 мМ и 2 мМ
- Г) 10,6 мкМ и 24 мкМ

10. Коэффициенты Стьюдента позволяют

- А) оценить, насколько текущее распределение случайных величин далеко до нормального распределения
- Б) оценить, сколько нужно выполнить экспериментов для достижения нормального распределения полученных данных
- В) внести поправку для соответствия расчетов по нормальному распределению с текущим распределением
- Г) показать, насколько реальное распределение не соотносится с нормальным распределением случайной величины

Вариант 3

1. Из предложенных выберите наилучший терапевтический индекс

- А) 0,1
- Б) 5
- В) 100
- Г) 10000

2. При расчете пространственного строения молекул, содержащих простые сигма-связи, наиболее выгодной является следующая конформация

- А) син-перипланарная
- Б) анти-перипланарная
- В) антиклиальная
- Г) гош-конформация

3. Изменение величин валентных углов моделируются в методе молекулярной механики по закону

- А) маятника
- Б) Гука
- В) периодическому
- Г) косинуса

4. Градиентом функции называется вектор,

- А) показывающий направление наибольшего возрастания функции. Модуль вектора градиента показывает скорость изменения функции.
- Б) показывающий направление наибольшего убывания функции. Модуль вектора градиента показывает скорость изменения функции.

- В) значение которого меняется от одной точки пространства к другой (скалярного поля), а по величине (модулю) равный значению функции в каждой конкретной точке
- Г) значение которого меняется в отдельных узловых точках пространства (скалярного поля), а по величине (модулю) равный скорости роста этой величины в этом направлении.

5. Биосинтез белка происходит на следующем «оборудовании» по следующей программе

- А) происходит трансляция с ДНК на РНК с последующей транскрипцией на рибосоме
- Б) происходит репликация с ДНК на РНК с последующей транскрипцией на лизосоме
- В) происходит транскрипция с РНК на ДНК с последующей трансляцией на рибосоме
- Г) происходит транскрипция с ДНК на РНК с последующей трансляцией на рибосоме

6. Выделяют следующие уровни организации структуры белка в порядке последовательности их сборки

- А) первичная, вторичная, третичная
- Б) третичная, вторичная, первичная
- В) денатурированная, первичная, вторичная, третичная
- Г) третичная, вторичная, первичная, денатурированная

7. Помимо целевой структуры данные рентгеноструктурного анализа часто содержат

- А) молекулы воды и других растворителей
- Б) различные ионы
- В) низкомолекулярные лиганды белков
- Г) все, обозначенное выше

8. Сайт www.exPASy.org предоставляет следующую информацию

- А) результаты секвенирования генома человека
- Б) всю имеющуюся на сегодняшний день информацию о белках
- В) данные о пространственных моделях белков, полученных методом сравнительного моделирования по гомологии, а также интерфейс доступа к суперкомпьютеру для проведения таких расчетов
- Г) данные о строении всех белков, для которых удалось получить кристаллы и провести их рентгеноструктурный анализ

9. Ошибка расчета в методе молекулярного докинга обусловлена следующими причинами

- А) сложность учета взаимной адаптации лиганда и рецептора друг к другу
- Б) невозможность учета влияния воды в структуре комплекса
- В) невозможность учета влияния ионов в структуре комплекса
- Г) все, описанное выше

10. Метод Монте-Карло позволяет

- А) находить соответствие сложных математических зависимостей с большим объемом простых статистических данных
- Б) с помощью точных расчетов сложных математических зависимостей давать прогноз для статистических зависимостей
- В) с помощью приближенных расчетов оценивать сложные математические зависимости
- Г) выиграть в рулетку в казино

Требования к представлению и оцениванию материалов (результатов):

Для успешной сдачи тестовых заданий необходимо правильно ответить на не менее 60% предложенных вопросов.

III. Промежуточная аттестация по дисциплине «Компьютерное моделирование свойств химических соединений»

Промежуточная аттестация студентов по дисциплине «Компьютерное моделирование свойств химических соединений» проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной. Промежуточная аттестация по дисциплине «Компьютерное моделирование свойств химических соединений» проводится в форме зачета и включает 1) ответы на контрольные вопросы для оценки знаний теоретических основ методов компьютерного моделирования; 2) защиту Отчета по результатам собственных исследований (кейс-задачи).

Оценочные средства для промежуточного контроля (зачет)

1. Список вопросов на зачет:

1. Физические основы взаимодействия рецептор-лиганд и их моделирование (силы Ван-дер-Ваальса, электростатическое взаимодействие, образование водородных связей, гидрофобные взаимодействия).
2. Моделирование строения рецептора (методы молекулярной механики)
3. Моделирование лиганда (основные квантово-механические методы расчёта строения молекул органических соединений).
4. Методы докинга 1: геометрический докинг, статистические методы (метод Монте-Карло, «simulated annealing»).
5. Методы докинга 2: методы направленного поиска глобального минимума функции (метод градиентного спуска, генетический алгоритм).
6. Прогноз спектра биологической активности неизвестного соединения. Алгоритм программы PASS.

Требования к представлению и оцениванию материалов (результатов):

К зачету допускаются обучающиеся, выполнившие программу обучения по дисциплине, прошедшие все этапы текущей аттестации.

Оценка	Требования к сформированным компетенциям
«зачтено»	Оценка <u>зачтено</u> с критерием на отлично выставляется обучаемому, если студент глубоко и прочно усвоил материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает; в ходе дополнительных вопросов не затрудняется с ответом.
	Оценка <u>зачтено</u> с критерием хорошо выставляется обучаемому, если студент твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос.
	Оценка <u>зачтено</u> с критерием удовлетворительно выставляется обучаемому, если студент имеет только поверхностные знания в рассматриваемой области, не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно точные

	формулировки, нарушения логической последовательности в изложении материала. Во всех приведенных примерах студенту выставляется оценка зачтено.
«не зачтено»	Оценка <u>не зачтено</u> выставляется обучаемому, если выявлено незнание студентом значительной части материала, при этом имеют место существенные ошибки. Выставляется студентам, которые не освоили теоретическую часть курса.

2. Кейс-задачи (ПР-9)

Задание:

Студент проводит моделирование биологической активности выбранного им лекарственного средства с его терапевтической мишенью и осуществляет направленную модификацию (молекулярный дизайн) данного соединения с целью получения улучшенных расчетных показателей целевой биологической активности.

Требования к представлению и оцениванию материалов (результатов):

Оценка	Требования к сформированным компетенциям
«зачтено»	Зачтено с характеристикой <u>отлично</u> выставляется обучаемому, если студент 1) на основании аналитического обзора литературы самостоятельно осуществил обоснованный выбор теоретической мишени (или предложил несколько равнозначных мишеней) для проведения докинга с исследуемым соединением путем сопоставления знаний о практической значимости рассмотренных рецепторов для создания новых лекарственных препаратов, наличием для них данных рентгеноструктурного анализа в базе данных PDB и возможности их применения для проведения докинга, степени схожести исследуемого соединения с известными лигандами данных рецепторов; 2) опираясь на методические указания из Практической части курса, самостоятельно осуществил моделирование серии производных и аналогов исследуемого соединения, докинг полученных моделей с выбранной терапевтической мишенью и сделал аргументированный выбор наиболее перспективных соединений для непосредственного получения, продемонстрировав тем самым владение навыком самостоятельной исследовательской работы; методами и приемами анализа теоретических и практических аспектов молекулярного докинга. Фактических ошибок и замечаний к оформлению работы нет или они не существенны.
	Зачтено с характеристикой <u>хорошо</u> выставляется обучаемому, если 1) студент осуществил поиск и систематизацию литературных данных о биологической активности исследуемого вещества и родственных ему соединений, однако не смог без помощи преподавателя

	<p>осуществить выбор терапевтической мишени для дальнейших исследований. Студент знает и умеет пользоваться современными базами данных для поиска литературы, однако не владеет в достаточной степени методами и приемами анализа результатов теоретических исследований, в частности не способен сопоставить степень структурной близости исследуемого соединения с лигандами рассматриваемых рецепторов; 2) студент с минимальным привлечением преподавателя осуществил моделирование серии производных и аналогов исследуемого соединения, докинг полученных моделей с выбранной терапевтической мишенью, но не смог без помощи преподавателя сделать аргументированный выбор наиболее перспективных соединений для непосредственного получения. Допущены одна-две ошибки в оформлении отчета.</p> <p>Зачтено с характеристикой удовлетворительно выставляется обучаемому, если 1) студент осуществил поиск необходимой литературы, но предоставил полностью переписанный исходный текст публикации без комментариев и анализа по рассматриваемой тематике. Студент умеет пользоваться современными базами данных, прочитал найденный материал, но не понял его содержание; 2) студент осуществил моделирование серии производных и аналогов исследуемого соединения и докинг полученных моделей с выбранной терапевтической мишенью исключительно с помощью преподавателя, а также не смог сделать аргументированный выбор наиболее перспективных соединений для непосредственного получения. Работа оформлена небрежно: допущено более трех существенных ошибок в ее оформлении.</p>
<p>«не зачтено»</p>	<p>Не зачтено выставляется обучаемому, если 1) студент предоставил литературу, не относящуюся к рассматриваемому предмету, предоставил полностью переписанный исходный текст публикации без комментариев и анализа по рассматриваемой тематике. Студент не умеет пользоваться современными базами данных, не изучил и не ориентируется в предоставленном материале; 2) студент не смог построить модель исследуемого соединения и серии его производных и аналогов; не предоставил результаты докинга полученных моделей с выбранной терапевтической мишенью, а также не смог сделать аргументированный выбор наиболее перспективных соединений для непосредственного получения. Работа оформлена крайне небрежно: допущено более пяти существенных ошибок в ее оформлении.</p>

III. Шкала оценки уровня достижения результатов обучения для текущей и промежуточной аттестации по дисциплине «Компьютерное моделирование свойств химических соединений»

Баллы (рейтинговая оценка)	Уровни достижения результатов обучения		Требования к сформированным компетенциям
	Текущая и промежуточная аттестация	Промежуточ- ная аттестация	
100 - 86	Повышенный	«зачтено»	Свободно и уверенно находит достоверные источники информации, оперирует предоставленной информацией, отлично владеет навыками анализа и синтеза информации, знает все основные методы решения проблем, предусмотренные учебной программой, знает типичные ошибки и возможные сложности при решении той или иной проблемы и способен выбрать и эффективно применить адекватный метод решения конкретной проблемы.
85-76	Базовый	«зачтено»	В большинстве случаев способен выявить достоверные источники информации, обработать, анализировать и синтезировать предложенную информацию, выбрать метод решения проблемы и решить ее. Допускает единичные серьезные ошибки в решении проблем, испытывает сложности в редко встречающихся или сложных случаях решения проблем, не знает типичных ошибок и возможных сложностей при решении той или иной проблемы.
75-61	Пороговый	«зачтено»	Допускает ошибки в определении достоверности источников информации, способен правильно решать только типичные, наиболее часто встречающиеся проблемы в конкретной области (обрабатывать информацию, выбирать метод решения проблемы и решать ее)
60-0	Уровень не достигнут	«не зачтено»	Не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические работы.