

SR-ИССЛЕДОВАНИЕ С ЭЛЕМЕНТАМИ ДРАГ-ДИЗАЙНА ДЛЯ СТУДЕНТОВ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ

Лаквич Ф.Ф., Ринейская О.Н.

УО «Белорусский государственный медицинский университет»

Минск, Беларусь

lakhvichtt@gmail.com

*При организации научных исследований студентов и школьников была использована технология дизайна и изучения моделей молекулярного докинга. В проведенных исследованиях изучена зависимость биологической активности (от строения как синтезированных ранее так и смоделированных веществ. При сравнении результатов *in vitro* и *in silico* предложены модели молекулярного докинга для массового скрининга веществ различных классов в разработке новых лекарственных средств.*

Ключевые слова: биологическая активность; драг-дизайн; молекулярный докинг; SR-исследование

STUDENT RESEARCH: TEACHING AND LEARNING DRUG DESIGN FOR PHARMACEUTICAL EDUCATION

T.T. Lakhvich, O.N. Ryneiskaya

Belarusian State Medical University

Minsk, Belarus

*University (mostly from School of Pharmacy) and High Scholl Students carried out the projects concerning the search and primary investigation of biological activity of organic substances as potential pharmaceutical drugs. Correlation between biological activity (both *in vitro* and *in silico*) and structure of both previously synthesized and modeled substance. Based on results analyzed molecular docking models for screening of substances of various classes in the development of new drugs have been proposed.*

Key words: SAR; drug design; molecular docking; student research.

Проблемно-ориентированное междисциплинарное обучение, философская основа которого была заложена философами-конструктивистами, характерно для университетов; лишь отдельные элементы такого подхода находят отражение в школьной практике. Систематическое использование исследовательской методики в учебном процессе способствует развитию навыков продуктивного и творческого мышления. Обучающе-исследовательский принцип (ОИП) обучения предусматривает такую организацию учебного процесса, при котором на каждом уровне обучения знания, навыки и умения приобретаются через овладение принципами научных исследований и непосредственное участие в исследовательской деятельности [11]. В этом случае адекватная организация учебного процесса позволяет использовать элементы ОИП не только в высшей, но и в средней школе. Ряд фундаментальных работ посвящен организации ОИП [6,8,10,11]. Также заслуживают внимания исследования по использованию исследовательских методик в обучении в рамках конкретных областей знаний, в частности студентов биомедицинских и естественных специальностей [1,2,7,9].

Студенты вузов, выполняя дипломные и кандидатские диссертации, проводят «настоящие» исследования. Но чем ниже степень образования, тем меньше степень реализации исследовательского компонента в процессе обучения. И только непрерывное образование со схожими целями, процедурами и технологиями на каждом уровне обучения и карьеры создает идеальную среду для формирования индивидуальной адаптивной компетенции. Таким образом, внедрение подходов, используемых на более высоких уровнях образования (например, университетских технологий для старшей школы или исследовательских методологий при обучении студентов университетов), в практику более низкого уровня способствует психологической, социокультурной и профессиональной адаптации студентов на более поздних этапах обучения и жизнь. В этом контексте особую роль играют такие исследования, основной целью которых является обучение, и в которых соответствующие знания и навыки приобретаются через овладение принципами научного исследования. Конечно, они во многом отличаются от «настоящие» исследования, но использует его основные этапы и методологию. Название Student Research (SR) прижилось в английской литературе; Традиционно этот термин относится не только к университетам, но и к средней школе.

SR-исследование часто ошибочно сводят к проведению экспериментов во время лабораторных занятий. Но, во-первых, не каждый лабораторный эксперимент - это исследование. Во-вторых, SR-исследование должно соответствовать процедуре и технологии реального исследования и включать в себя постановку целей исследования, работу с литературой, планирование и проведение эксперимента, получение данных, их анализ и интерпретацию, обобщение и окончательное представление результатов (публикации, конференции и т. д.). Университеты, в отличие от средней школы, обеспечены оборудованием и ресурсами для проведения исследований. Но даже в университетах студенты ограничены во времени, поскольку они вовлечены в различные формы другой учебной деятельности в соответствии с учебной программой. Это делает идею «настоящего исследования» призрачной для большинства студентов. Для решения этой задачи педагог должен организовать для учащихся исследование таким образом, чтобы учесть все процедурные, психологические и дидактические аспекты учебного процесса [11]:

- использовать только отдельные элементы исследовательской технологии: чем выше степень образования, тем ближе SR-исследование к реальному;

- эксперимент не обязательно должен быть абсолютно инновационным, ключевым является субъективная новизна исследования для студентов;

- проведение исследований преследует прежде всего образовательные и воспитательные, а не утилитарные цели

- моделирование, а не бездумная передача «реальной» проблемной ситуации научного исследования, с исключением дорогостоящих и нецелевых для учебного процесса элементов, дорогостоящего оборудования и материалов;

- учёт психофизиологическим характеристикам учащихся определенной возрастной группы.

Учебный процесс в медицинских вузах традиционно ориентирован на практику и включает только отдельные элементы исследовательской технологии. Мы внедрили элементы SR-исследований при работе со студентами 1-3 курсов фармацевтического факультета БГМУ до того, как они начали выполнять свои первые «настоящие» исследования в рамках курсовых и дипломных проектов. Студентам предложили ряд задач по поиску и первоначальной оценке биологической активности органических веществ (как потенциальных лекарств). Молекулярный докинг [3,7] - ключевой элемент исследовательского проекта. Реализация проекта включает обзор литературы и анализ лекарственных средств (журналы, базы данных лекарств); выбор возможных субстратов (база данных PDB); разработка модели *in silico* (на основе данных о биологической активности ряда синтезированных веществ *in vitro*); молекулярный дизайн новых веществ-кандидатов (на основе изучения SAR и технолого-экономической оценки возможности синтеза), их активность в отношении субстратов выбранной модели. Результаты коррелировали с данными предыдущих исследований и были представлены на студенческих конференциях и в научных журналах. Показано, что SR-исследования мотивируют студентов к изучению профессионально ориентированных тем, формируют профессиональные компетенции в области фармацевтической химии и молекулярной биологии, а также облегчают выбор тем для дипломных и магистерских диссертаций. И конечно же, модели получились красивыми и полезными, что полностью соответствует концепции Beauty [4].

SR-исследования проводились также в средней школе. Были сформированы группы, состоящие из преподавателей и студентов университета, преподавателей и учащихся школы. В такой группе каждый из участников выполняет разные роли. Например, учитель, с одной стороны, приобретает (роль ученика) новые знания, а с другой - профессионально направляет усилия учеников, используя их навыки в дидактике и социальном менеджменте. Студент, помимо своей обычной деятельности, управляет и обучает не только ученика, но также, в значительной степени, школьного учителя. Студенты чувствуют себя членами единой команды, они выполняют общий исследовательский проект. В таких группах мы наблюдаем настоящий обмен компетенциями, профессиональным и жизненным опытом.

Проведение НИР в совместных группах с участием преподавателей и студентов способствует социальной интеграции, формированию новых профессиональных и адаптивных компетенций у всех участников проекта. Студенты приобретают навыки и знания на университетском уровне, что способствует социальной адаптации в дальнейшем обучении. Студенты университета развивают свои навыки и знания, руководя учениками и их учителями. Это помогает адаптироваться к будущей профессиональной деятельности, требующей компетенций, позволяющих эффективно работать в команде. Учителя повышают свои профессиональные и социальные компетенции, работая не только со своими основными учениками, но и со студентами других возрастных групп, а также с коллегами.

Одно из самых кратких и емких определений научного исследования свидетельствует о нем как о «*systematic inquiry that is made public and exposed to*

collective criticism» (Stenhouse, в [8], с. 120). Проведение НИР в учебном процессе полностью соответствует этому определению: направленное на достижение учебных целей, способствует публичности деятельности студентов и формирует навыки систематической работы и критического мышления.

Список литературы

1. Amgad, M. Medical student research: an integrated mixed-methods systematic review and meta-analysis. / M. Amgad, M. Tsui // PLoS – 2015. 10 (6), e0127470.
2. Ballamingie, P. Publishing graduate student research in geography: the fundamentals. // P. Ballamingie, S. Tudin // Journal of Geography in Higher Education, 2010. - 37(2), 304-314.
3. Kitchen, D.B Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: Methods and applications. / D.B. Kitchen, H. Decornez // Nature Reviews Drug Discovery, 2004. - 3(11), 935–949
4. Lakhvich, T. Beautylity of chemistry visualization: Whether useful can be aesthetic. // PEC, 2010. - 19, 46-50.
5. Lakhvich, T. Student Research: Acquiring Knowledge about the Nature and Process of Science // JBSE, 2017. - 16 (6), p. 832-835
6. Peters, M.J. (2012). The management of a student research project. Gower Publishing, Ltd..
7. Ragno, R. Teaching and Learning Computational Drug Design: Student Investigations of 3D Quantitative SAR through Web Applications. // R. Ragno, V. Esposito / *J. Chem. Educ.* 2020. – 97 (7), 1922–1930
8. Rudduck, J. & Hopkins, D. (1985). Research as a Basis for Teaching: Readings from the work of Lawrence Stenhouse. London: Heinemann.
9. Slack, M.K., A systematic review of extramural presentations and publications from pharmacy student research programs. / M.K. Slack, J. Martin // American Journal of pharmaceutical education, 2016. - 80(6), 100.
10. Strayhorn, T. L. (2013). Theoretical frameworks in college student research. UPA: 2013.
11. Братенникова, А. Н. Обучающе-исследовательский принцип как средство реализации преемственности при формировании адаптивных компетенций специалиста. // А. Н. Братенникова, Е. И. Василевская, Ф. Ф. Лахвич // Адаптация к профессиональной деятельности как психолого-педагогическая проблема: Мат. межд. конф. Барановичи: БГВПК, 2001. – С. 29-33.