

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет
имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации
(ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России)**

Медико-биологический факультет

«УТВЕРЖДАЮ»

**Декан медико-биологического факультета
д-р биол. наук, проф.**

_____ **Е.Б. Прохорчук**

«29» августа 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б.1.В.В.5.1 «КОМПЬЮТЕРНОЕ КОНСТРУИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ»

для образовательной программы высшего образования -
программы специалитета
по специальности
30.05.01 Медицинская биохимия

Москва 2022 г.

Настоящая рабочая программа дисциплины Б.1.В.В.5.1 «Компьютерное конструирование лекарств» (Далее – рабочая программа дисциплины) является частью программы специалитета 30.05.01 Медицинская биохимия.

Направленность (профиль) образовательной программы: Медицинская биохимия.

Форма обучения: очная

Рабочая программа дисциплины подготовлена на кафедре биоинформатики (далее – кафедра) ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России авторским коллективом под руководством заведующего кафедрой Лагунина Алексей Александровича, доктора биологических наук, профессора РАН.

Составители:

№ п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Ученая степень, ученое звание	Занимаемая должность	Основное место работы	Подпись
1.	Шилов Борис Владимирович	канд. мед. наук	Доцент кафедры биоинформатики МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	
2.	Лагунин Алексей Александрович	д-р биол. наук, проф. РАН	Зав. кафедрой биоинформатики МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры (Протокол № 8 от «06» июня 2022 г.).

Рабочая программа дисциплины рекомендована к утверждению рецензентами:

№ п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Ученая степень, ученое звание	Занимаемая должность	Основное место работы	Подпись
1.	Мошковский Сергей Александрович	д-р биол. наук, проф.	зав. кафедрой биохимии МБФ	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена советом медико-биологического факультета, протокол № 1 от «29» августа 2022 г.

Нормативно-правовые основы разработки и реализации рабочей программы дисциплины:

- 1) Образовательный стандарт высшего образования по специальности 30.05.01 Медицинская биохимия (уровень специалитет), утвержденный Приказом ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России от 29.05.2020 № 365 рук (далее ОС ВО).
- 2) Общая характеристика образовательной программы.
- 3) Учебный план образовательной программы.
- 4) Устав и локальные акты Университета.

1. Общие положения

1.1. Цель и задачи освоения дисциплины

1.1.1. Формирование системных знаний по аспектам связанным с поиском и созданием новых лекарственных веществ, приобретение умений и навыков по основным компьютерным методам, применяющимся на разных этапах исследования и конструирования лекарственных веществ.

1.1.2. Задачи, решаемые в ходе освоения программы дисциплины:

- Изучение основ представления химической информации и анализа зависимости «структура-активность» физиологически активных соединений.

- Формирование системных знаний по хемоинформатике, связанных с поиском и созданием новых лекарственных веществ.

- Выработка у студентов способности использовать доступные интернет ресурсы для поиска и анализа информации о биологической активности соединений, полученных путем химического и биологического синтеза.

- Изучение современных направлений и перспектив развития компьютерного конструирования лекарственных веществ.

- Формирование представлений о компьютерной фармакологии и токсикологии.

1.2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина Б.1.В.В.5.1 «Компьютерное конструирование лекарств» изучается в 10 семестре и относится к дисциплинам по выбору части Блок Б1 Дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся должны освоить следующие дисциплины, формируемые предыдущим образованием: Иностранный язык, Высшая математика, Теория вероятности и математическая статистика, Основы информационных технологий, Органическая химия, Биохимия, Молекулярная фармакология, Оптика, атомная физика.

Знания, умения и опыт практической деятельности, приобретенные при освоении настоящей дисциплины, необходимы для успешного освоения практики: Преддипломная, НИР.

1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины

10 семестр

Код и наименование компетенции	
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины (уровень сформированности индикатора (компетенции)) Общепрофессиональные компетенции
ОПК-6 - Способен определять стратегию и проблематику исследований, выбирать оптимальные способы их решения, проводить системный анализ объектов исследования, отвечать за правильность и обоснованность выводов, внедрение полученных результатов в практическое здравоохранение	
ОПК-6.ИД1 – Планирует научное исследование.	<p>Знать: Основные подходы, методы и источники данных, используемых в компьютерном конструировании лекарств.</p> <p>Уметь: Составлять план для создания (Q)SAR моделей, докинга, виртуального скрининга и оптимизации соединений.</p> <p>Владеть практически м опытом (трудовыми действиями): Создания (Q)SAR моделей, проведения докинга, виртуального скрининга и оптимизации соединений.</p>
ОПК-6.ИД2 – Анализирует результаты научного исследования.	<p>Знать: Основные математические принципы, алгоритмы, структуры данных, на которых основаны существующие компьютерные программы, используемые в компьютерном конструировании лекарств</p> <p>Уметь: Качественно и количественно, оценивать статистическую значимость получаемых результатов</p> <p>Владеть практически м опытом (трудовыми действиями): Навыками использования основных принципов, алгоритмов и методов используемых в компьютерном конструировании лекарств</p>
ОПК-6.ИД3 – Формулирует выводы на основании результатов исследования с оценкой возможности внедрения полученных результатов в практическое здравоохранение.	<p>Знать: Основные задачи и методы компьютерного конструирования лекарств; использование информационных компьютерных систем хранящих информацию о структуре и биологической активности веществ. Принципы формулирования выводов проводимых исследований.</p> <p>Уметь: Самостоятельно формулировать выводы на основе результатов исследования в компьютерном конструировании лекарств.</p> <p>Владеть практически м опытом (трудовыми действиями): Формулирования выводов на основе результатов исследования в компьютерном конструировании лекарств.</p>
ОПК-7 - Способен обеспечить информационно-технологическую поддержку в области здравоохранения, применять средства информационно-коммуникационных технологий и ресурсы биоинформатики в профессиональной деятельности, выполнять требования информационной безопасности	
ОПК-7.ИД1 – Применяет современные информационные технологии и специализированное программное обеспечение для решения профессиональных задач.	<p>Знать: Основные подходы к представлению информации о структуре химических соединений и анализу взаимосвязи «структура-активность».</p> <p>Уметь: Создавать компьютерные модели зависимости «структура-активность».</p> <p>Владеть практически м опытом (трудовыми действиями): Использования компьютерных программ и баз данных для создания компьютерных моделей зависимостей «структура-активность».</p>

ОПК-7.ИД2 – Осуществляет поиск информации с использованием информационно-коммуникационных технологий и ресурсов биоинформатики для решения задач профессиональной деятельности.

Знать:

Основные электронные базы данных химических соединений и лекарственных веществ, содержащие информацию об их структуре, свойствах и биологической активности.

Уметь:

Работать с основными электронными базами-данных химических соединений и лекарственных веществ, содержащие информацию об их структуре, свойствах и биологической активности

Владеть

практически

м опытом

(трудовыми

действиями):

Поиска, хранения и обработки данных, связанных со структурами, биологической активностью и физико-химическими свойствами химических соединений и лекарств

ПК-3 - Способен разрабатывать и выполнять доклинические исследования (испытания) лекарственных средств для медицинского применения, в том числе биологических лекарственных средств, биомедицинских клеточных продуктов.

ПК-3.ИД3 – **ПК-3.ИД3** – Выбирает статистические методы для обработки результатов доклинического исследования (испытания) лекарственного средства для медицинского применения, в том числе биологических лекарственных средств, биомедицинских клеточных продуктов.

Знать:

Основные идентификаторы и форматы представления структур химических соединений; методы машинного обучения; основные физико-химические свойства; единицы измерения и виды данных описывающих фармакологические свойства лекарственных соединений

Уметь:

Применять методами анализа связи «структура-активность». Оценивать точность полученных моделей и результатов исследований.

Владеть

практически

м опытом

(трудовыми

действиями):

Компьютерными программами DataWarrior, KNIME, GUSAR, PyMol, Autodock, необходимыми для анализа связи «структура-активность»

2. Формы работы обучающихся, виды учебных занятий и их трудоёмкость

Формы работы обучающихся / Виды учебных занятий/ Формы промежуточной аттестации	Всего часов	Распределение часов по семестрам												
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
Учебные занятия														
<i>Контактная работа обучающихся с преподавателем в семестре (КР), в т.ч.:</i>	36											36		
Лекционное занятие (ЛЗ)	18											18		
Семинарское занятие (СЗ)	16											16		
Практическое занятие (ПЗ)														
Практикум (П)														
Лабораторно-практическое занятие (ЛПЗ)														
Лабораторная работа (ЛР)														
Клинико-практические занятия (КПЗ)														
Специализированное занятие (СПЗ)														
Комбинированное занятие (КЗ)														
Коллоквиум (К)	2											2		
Контрольная работа (КР)														
Итоговое занятие (ИЗ)														
Групповая консультация (ГК)														
Конференция (Конф.)														
Иные виды занятий														
<i>Самостоятельная работа обучающихся в семестре (СРО), в т.ч.</i>	36											36		
Подготовка к учебным аудиторным занятиям	36											36		
Подготовка истории болезни														
Подготовка курсовой работы														
Подготовка реферата														
Иные виды самостоятельной работы (в т.ч. выполнение практических заданий проектного, творческого и др. типов)														
Промежуточная аттестация														
<i>Контактная работа обучающихся в ходе промежуточной аттестации (КРПА), в т.ч.:</i>														
Зачёт (З)														
Защита курсовой работы (ЗКР)														
Экзамен (Э)														
<i>Самостоятельная работа обучающихся при подготовке к промежуточной аттестации (СРПА), в т.ч.</i>														
Подготовка к экзамену														
Общая трудоёмкость дисциплины (ОТД)	в часах: ОТД = КР+СРС+КРПА+СРПА	72										72		
	в зачетных единицах: ОТД (в часах):36	2										2		

3. Содержание дисциплины

3.1. Содержание разделов, тем дисциплины

№ п/п	Шифр компетенции	Наименование раздела, темы дисциплины	Содержание раздела и темы в дидактических единицах
1	2	3	4
1.	ОПК-6.ИД1 ОПК-6.ИД2 ОПК-6.ИД3 ОПК-7.ИД1 ОПК-7.ИД2 ПК-3.ИД3	Раздел 1. Хемоинформатика	Основные методы и подходы. Форматы представления структур. Идентификаторы химических соединений. Наиболее известные базы данных (БД) представляющие информацию о структурах и биологической активности химических соединений. Описание химических соединений в (БД), молекулярные отпечатки. Анализ графов в хемоинформатике. Методы поиска химических соединений в базах данных. Сходство химических соединений и понятие «activity cliff». Основные методы и подходы анализа связи «структура-свойство». (Q)SAR. Дескрипторы химических соединений. Методы машинного обучения, используемые при построении взаимосвязи «структура-активность». Валидация (Q)SAR моделей. Компьютерные программы и интернет ресурсы, используемые для оценки фармакологических и физико-химических свойств лекарственно-подобных соединений. KNIME. Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов и взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарственного вещества. Компьютерная оценка всасывания биотранспорта, распределения, метаболизма и выведения в зависимости от структуры лекарственного вещества. Компьютерная оценка межлекарственного взаимодействия. Заместители: качественные и количественные аспекты взаимосвязи структура – активность. Биоизостеризм.
2.	ОПК-6.ИД1 ОПК-6.ИД2 ОПК-6.ИД3 ОПК-7.ИД1 ОПК-7.ИД2 ПК-3.ИД3	Раздел 2. Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка.	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий. Методы 3D-QSAR. Создание фармакофоров и фармакофорный поиск. Виртуальный скрининг и докинг. Области применения и ограничения молекулярного докинга.

3.2. Перечень разделов, тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися

Тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися в программе не предусмотрено.

4. Тематический план дисциплины

4.1. Тематический план контактной работы обучающихся с преподавателем

№ п/п	Виды учебных занятий/	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименование разделов (модулей) (при наличии). Порядковые номера и наименование тем (модулей) модулей. Темы учебных занятий.	Количество часов	Виды текущего контроля успеваемости**	Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации ***					
					КП	РЗ	ОУ	ТЭ		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
10 семестр										
1	Тема 1. Хемоинформатика									
1.1	ЛЗ	Введение в хемоинформатику. Форматы представления структур химических соединений. Идентификаторы структур	2	Д	+					
1.2	ЛЗ	Базы данных химических и лекарственных соединений	2	Д	+					
1.3	ЛЗ	Анализ связи «структура- свойство».	2	Д	+					
1.4	ЛЗ	Компьютерная оценка побочных эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями, АДМЕ, межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества.	2	Д	+					
1.5	ЛЗ	Компьютерная оценка фармакологических эффектов. Поиск лекарственных мишеней. Базы данных мишеней лекарственных соединений.	2	Д	+					
1.6	ЛЗ	Заместители: качественные и количественные аспекты взаимосвязи структура – активность. Биоизостеризм.	2	Д	+					
1.7	ПЗ	Рисование структур химических соединений в химическом редакторе Marvin Applet. Конвертация различных форматов представления структур химических соединений в OpenBabel	2	Т	+	+				
1.8	ПЗ	Создание обучающих и тестовых выборок для анализа связи «структура-свойство» в Datawarior	2	Т	+	+				
1.9	ПЗ	Построение и оценка моделей связи «структура-активность». Компьютерная программа GUSAR	2	Т	+	+				
1.10	ПЗ	Работа с KNIME. Построение	2	Т	+	+				

		классификационной модели для прогноза мутагенности								
1.11	ПЗ	Использование KNIME для создания QSAR моделей	2	Т	+	+				
1.12	ПЗ	Оценка возможных побочных эффектов и ADME свойств отобранных соединений. Отбор наиболее перспективных соединений.	2	Т	+	+				
2	Тема 2. Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка									
2.1	ЛЗ	Молекулярное моделирование и виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени	2	Д	+					
2.2	ЛЗ	Методы 3D-QSAR. Создание фармакофоров и фармакофорный поиск.	2	Д	+					
2.3	ПЗ	Введение в AutoDock. Визуализация 3D структур и изучение свойств белковых молекул при помощи программы PyMol.	2	Т	+	+				
2.4	ПЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock.	2	Т	+	+				
2.5	ПЗ	Создание фармакофоров и фармакофорный поиск.	2	Т	+	+				
2.6	К	Коллоквиум по теме 1,2	2	Р	+		+	+		
		Всего за семестр:	36							
		Всего по дисциплине:	36							

Условные обозначения:

Виды учебных занятий и формы промежуточной аттестации *

Виды учебных занятий, формы промежуточной аттестации	Сокращённое наименование	
	Лекционное занятие	Лекция
Семинарское занятие	Семинар	СЗ
Практическое занятие	Практическое	ПЗ
Практикум	Практикум	П
Лабораторно-практическое занятие	Лабораторно-практическое	ЛПЗ
Лабораторная работа	Лабораторная работа	ЛР
Клинико-практические занятия	Клинико-практическое	КПЗ
Специализированное занятие	Специализированное	СЗ
Комбинированное занятие	Комбинированное	КЗ
Коллоквиум	Коллоквиум	К

Контрольная работа	Контр. работа	КР
Групповая консультация	Групп. консультация	КС
Конференция	Конференция	Конф.
Зачёт	Зачёт	З
Защита курсовой работы	Защита курсовой работы	ЗКР
Экзамен	Экзамен	Э

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**	Сокращённое наименование		Содержание
Текущий дисциплинирующий контроль	Дисциплинирующий	Д	Контроль посещаемости занятий обучающимся
Текущий тематический контроль	Тематический	Т	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности на занятиях по теме.
Текущий рубежный (модульный) контроль	Рубежный	Р	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме (разделу) дисциплины
Текущий итоговый контроль	Итоговый	И	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по темам (разделам) дисциплины

Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся /виды работы обучающихся/ ***

№	Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся (ФТКУ) ***	Техническое и сокращённое наименование		Виды работы обучающихся (ВРО) ***	Типы контроля
1	Контроль присутствия (КП)	Присутствие	КП	Присутствие	Присутствие
2	Учет активности (А)	Активность	А	Работа на занятии по теме	Участие
3	Опрос устный (ОУ)	Опрос устный	ОУ	Выполнение задания в устной форме	Выполнение обязательно
4	Опрос письменный (ОП)	Опрос письменный	ОП	Выполнение задания в письменной форме	Выполнение обязательно
5	Опрос комбинированный (ОК)	Опрос комбинированный	ОК	Выполнение заданий в устной и письменной форме	Выполнение обязательно
6	Тестирование в электронной форме (ТЭ)	Тестирование	ТЭ	Выполнение тестового задания в электронной форме	Выполнение обязательно
7	Проверка реферата (ПР)	Реферат	ПР	Написание (защита) реферата	Выполнение обязательно
8	Проверка лабораторной работы (ЛР)	Лабораторная работа	ЛР	Выполнение (защита) лабораторной работы	Выполнение обязательно
9	Подготовка учебной истории болезни (ИБ)	История болезни	ИБ	Написание (защита) учебной истории болезни	Выполнение обязательно
10	Решение практической (ситуационной) задачи (РЗ)	Практическая задача	РЗ	Решение практической (ситуационной) задачи	Выполнение обязательно
11	Подготовка курсовой работы (ПКР)	Курсовая работа	ПКР	Выполнение (защита) курсовой работы	Выполнение обязательно
12	Клинико-практическая работа (КПР)	Клинико-практическая работа	КПР	Выполнение клинико-практической работы	Выполнение обязательно

13	Проверка конспекта (ПК)	Конспект	ПК	Подготовка конспекта	Выполнение обязательно
14	Проверка контрольных нормативов (ПКН)	Проверка нормативов	ПКН	Сдача контрольных нормативов	Выполнение обязательно
15	Проверка отчета (ПО)	Отчет	ПО	Подготовка отчета	Выполнение обязательно
16	Контроль выполнения домашнего задания (ДЗ)	Контроль самостоятельной работы	ДЗ	Выполнение домашнего задания	Выполнение обязательно, Участие
17	Контроль изучения электронных образовательных ресурсов (ИЭОР)	Контроль ИЭОР	ИЭОР	Изучения электронных образовательных ресурсов	Изучение ЭОР

5. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине

5.1. Планируемые результаты обучения по темам и разделам дисциплины

Планируемые результаты обучения по темам и разделам дисциплины, соотнесенные с планируемыми результатами освоения дисциплины – согласно п. 1.3. и содержанием дисциплины – согласно п.3. настоящей рабочей программы дисциплины.

5.2. Формы проведения текущего контроля успеваемости

Текущий контроль успеваемости обучающегося в семестре осуществляется в формах, предусмотренных тематическим планом настоящей рабочей программы дисциплины (см. п. 4.1).

5.3. Критерии, показатели и оценочные средства текущего контроля успеваемости обучающихся

5.3.1. Условные обозначения:

Типы контроля (ТК)*

Типы контроля		Тип оценки	
Присутствие	П	наличие события	
Участие (дополнительный контроль)	У	дифференцированный	
Изучение электронных образовательных ресурсов (ЭОР)	И	наличие события	
Выполнение (обязательный контроль)	В	дифференцированный	

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**	Сокращённое наименование		Содержание
Текущий дисциплинирующий контроль	Дисциплинирующий	Д	Контроль посещаемости занятий обучающимся
Текущий тематический контроль	Тематический	Т	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности на занятиях по теме.
Текущий рубежный (модульный) контроль	Рубежный	Р	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме (разделу, модулю)

			дисциплины
Текущий итоговый контроль	Итоговый	И	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по темам (разделам, модулям) дисциплины

5.3.2. Структура текущего контроля успеваемости по дисциплине

10 семестр

Виды занятий		Формы текущего контроля успеваемости/виды работы		ТК*	ВТК**	Max.	Min.	Шаг
Лекционное занятие	ЛЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
				П	Д	1	0	0
Практическое занятие	СЗ	Практическая задача	ОУ	В	Т	10	0	1
				В	Т	10	0	1
Коллоквиум	К	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
				В	Р	30	0	1
				В	Р	20	0	1

5.3.3. Весовые коэффициенты текущего контроля успеваемости обучающихся (по видам контроля и видам работы)

10 семестр

Вид контроля	План %	Исходно		Формы текущего контроля успеваемости/виды работы	ТК	План %	Исходно		Коэф.
		Баллы	%				Баллы	%	
Текущий дисциплинирующий контроль	10	26	9.42	Контроль присутствия	П	10	26	9.42	0.38
Текущий тематический контроль	60	150	54.4	Выполнение лабораторной работы	В	60	150	54.4	0.4
Текущий рубежный (модульный) контроль	30	100	36.2	Опрос устный	В	10	40	14.5	0.25
				Опрос письменный	В	10	60	21.7	0.17
Мах кол. баллов	100	276							

5.4. Методические указания по порядку проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине по формам текущего контроля, предусмотренным настоящей рабочей программой дисциплины

Методические указания по порядку проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине по формам текущего контроля, предусмотренным настоящей рабочей программой дисциплины (см. п. 5.3.2) подготавливаются кафедрой и объявляются преподавателем накануне проведения текущего контроля успеваемости.

6. Организация промежуточной аттестации обучающихся

10 семестр

- 1) Форма промежуточной аттестации согласно учебному плану – зачет.
- 2) Форма организации промежуточной аттестации:

– на основании семестрового рейтинга

7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

7.1. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (по периодам освоения образовательной программы) – согласно п. 1.3. настоящей рабочей программы дисциплины

7.2. Критерии, показатели и порядок промежуточной аттестации обучающихся с использованием балльно-рейтинговой системы. Порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок

10 семестр

Порядок промежуточной аттестации обучающегося по дисциплине в форме зачёта

Промежуточная аттестация по дисциплине в форме зачёта проводится на основании результатов текущего контроля успеваемости обучающегося в семестре, в соответствии с расписанием занятий по дисциплине, как правило на последнем занятии.

Время на подготовку к промежуточной аттестации не выделяется.

Критерии, показатели и порядок балльно-рейтинговой системы промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю) в форме зачёта, а также порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок устанавливается Положением о балльно-рейтинговой системе текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации с изменениями и дополнениями (при наличии).

8. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины

Освоение обучающимися учебной дисциплины складывается из контактной работы, включающей занятия лекционного типа (лекции) и занятия семинарского типа (семинарские занятия, коллоквиумы), а также самостоятельной работы. Контактная работа с обучающимися предполагает проведение текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации.

Для подготовки к занятиям лекционного типа (лекциям) обучающийся должен:

- внимательно прочитать материал предыдущей лекции;
- ознакомиться с учебным материалом по учебнику, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам с темой прочитанной лекции;
- внести дополнения к полученным ранее знаниям по теме лекции на полях лекционной тетради;
- записать возможные вопросы, которые следует задать преподавателю по материалу изученной лекции.

Для подготовки к занятиям семинарского типа обучающийся должен:

- внимательно изучить теоретический материал по конспекту лекции, учебникам, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам;

- подготовиться к выступлению на заданную тему, если данное задание предусмотрено по дисциплине;
- выполнить письменную работу, если данное задание предусмотрено по дисциплине;
- подготовить доклад, презентацию или реферат, если данное задание предусмотрено по дисциплине.

Самостоятельная работа обучающихся является составной частью обучения и имеет целью закрепление и углубление полученных знаний, умений и навыков, поиск и приобретение новых знаний, выполнение учебных заданий, подготовку к предстоящим занятиям, текущему контролю успеваемости и промежуточной аттестации.

Выполнение домашних заданий осуществляется в форме:

- работы с учебной, учебно-методической и научной литературой, электронными образовательными ресурсами (например, просмотр видеолекций или учебных фильмов), конспектами обучающегося: чтение, изучение, анализ, сбор и обобщение информации, её конспектирование и реферирование, перевод текстов, составление профессиональных глоссариев;
- подготовки тематических сообщений и выступлений;
- выполнения письменных контрольных работ.

Текущий контроль успеваемости обучающихся по дисциплине осуществляется в ходе проведения отдельного вида занятия – коллоквиума. Текущий контроль включает в себя текущий тематический контроль и текущий рубежный (модульный) контроль.

Для подготовки к текущему тематическому контролю обучающегося следует изучить учебный материал по теме занятия или отдельным значимым учебным вопросам, по которым будет осуществляться опрос.

Для подготовки к текущему рубежному (модульному) контролю обучающегося следует изучить учебный материал по наиболее значимым темам и (или) разделам дисциплины в семестре.

Промежуточная аттестация в форме зачета по дисциплине проводится на основании результатов текущего контроля успеваемости обучающегося в семестре.

9. Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины

9.1. Литература по дисциплине:

№ п/п	Автор, название, место издания, издательство, год издания	Наличие литературы в библиотеке	
		Кол. экз.	Электр. адрес ресурса
1	2	3	4
1	Пособия «Введение в хемоинформатику». «Компьютерное представление химических структур», «Химические базы данных» и «Моделирование «структура-свойство». Маджидов Т.И., Баскин И.И., Антипин И.С., Варнек А.А. 2013, 2015, Казань	20	
2	Молекулярное моделирование [Электронный ресурс] : теория и практика : пер. с англ. / Х.-Д. Хельтье [и др.]. – 3-е изд. (эл.). – Москва : БИНОМ.		http://www.studmedlib.ru/cgi-bin/

	Лаб. знаний, 2015. – 322 с. - Режим доступа: http://marc.rsmu.ru:8020/marcweb2/Default.asp .	mb4x?usr_data=access(2med,0YI8E LM6704SLM6 S-X097,ISBN978 5996324019,1,1 ms0ylsqdku,ru, ru)
--	---	---

Книгообеспеченность образовательной программы представлена по ссылке
<https://rsmu.ru/library/resources/knigoobespechennost/>

9.2. Перечень ресурсов информационно - телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины, профессиональные базы данных

1. <http://eor.edu.ru>
2. <http://www.elibrary.ru>
3. ЭБС «Консультант студента» www.studmedlib.ru
4. <http://www.books-up.ru> (электронная библиотечная система);
5. <http://www.biblioclub.ru> (электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» РНИМУ им. Пирогова);
6. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
7. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
8. <http://www.drugbank.ca/>
9. <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
10. <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/>
11. <https://clinicaltrials.gov/>
12. <http://www.chemspider.com/>
13. <http://zinc.docking.org/>
14. <http://www.rlsnet.ru/>
15. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
16. <http://bidd.nus.edu.sg/group/cjttd/>
17. <http://bidd.nus.edu.sg/group/drt/dart.asp>
18. <http://www.genome.jp/kegg/>
19. https://mcule.com/apps/1-click-docking/?utm_source=ccl&utm_medium=maillist&utm_campaign=1-click-docking
20. <http://www.way2drug.com>
21. <http://biomolecula.ru/insilico/>

9.3. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

1. Автоматизированная образовательная среда университета.
2. Балльно-рейтинговая система контроля качества освоения образовательной программы в автоматизированной образовательной системе университета.
3. Наличием свободно распространяемого установленного программного обеспечения, связанного с компьютерным конструированием лекарств (PyMol, KNIME).
4. Microsoft Office Word
5. Microsoft Office Excel
6. Adobe Acrobat

9.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Лекционная аудитория, оборудованная мультимедийным оборудованием.
2. Учебная комната, расположенная в помещениях Университета.
3. Мультимедийный комплекс (ПК или ноутбук, проектор, экран).
4. Наборы мультимедийных наглядных материалов по различным разделам учебной дисциплины.
5. Компьютерный класс с доступом в интернет.

Организация обеспечена необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения (состав определяется в рабочей программе дисциплины и подлежит обновлению при необходимости).

Библиотечный фонд укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 0,25 экземпляра каждого из изданий, указанных в рабочей программе дисциплины, на одного обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих соответствующую дисциплину.

Обучающимся обеспечен доступ (удаленный доступ), в том числе в случае применения электронного обучения, дистанционных образовательных технологий, к современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам, состав которых определяется в рабочей программе дисциплины и подлежит обновлению (при необходимости).

Обучающиеся из числа инвалидов и лиц с ОВЗ обеспечены печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

Заведующий кафедрой

А.А. Лагунин

	Содержание	Стр.
1.	Общие положения	4
2.	Формы работы обучающихся, виды учебных занятий и их трудоёмкость	7
3.	Содержание дисциплины (модуля)	8
4.	Тематический план дисциплины (модуля)	9
5.	Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине (модулю)	12
6.	Организация промежуточной аттестации обучающихся	13
7.	Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)	14
8.	Методические указания обучающимся по освоению дисциплины (модуля)	14
9.	Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	15