

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 «ХЕМОИНФОРМАТИКА»

**для образовательной программы высшего образования -
программы специалитета
по специальности
30.05.03 Медицинская кибернетика
(профиль: Биоинформатика)**

Москва 2022 г.

Настоящая рабочая программа дисциплины Б.1.В.В.6.1 «Хемоинформатика» (Далее – рабочая программа дисциплины) является частью программы специалитета 30.05.03 Медицинская кибернетика.

Направленность (профиль) образовательной программы: Биоинформатика.

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 30.05.03 Медицинская кибернетика (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, компьютерным программам и базам данных, применяющимся на разных этапах исследования и конструирования лекарственных веществ.

1.1.2. Задачи, решаемые в ходе освоения программы дисциплины:

- Сформировать основы представления химической информации и анализа зависимости «структура-активность» физиологически активных соединений.
- Сформировать системные знания по хемоинформатике, связанных с поиском и созданием новых лекарственных веществ.
- Выработать у студентов способности использовать доступные интернет ресурсы для поиска и анализа информации о биологической активности соединений, полученных путем химического и биологического синтеза.
- Формировать представлений о компьютерной фармакологии и токсикологии.
- Углубленное изучение методов компьютерного конструирования лекарств на основе структуры лигандов.

1.2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина Б.1.В.В.6.1 «Хемоинформатика» изучается в 9 семестре и относится к обязательной части Блока Б1 Дисциплины.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся должны освоить следующие дисциплины, формируемые предыдущим образованием: Теория вероятности и математическая статистика; Основы информационных технологий; Биохимия; Фармакология; Общая патология: патологическая анатомия, патофизиология.

Знания, умения и опыт практической деятельности, приобретенные при освоении настоящей дисциплины, необходимы для практики: Практика по компьютерной фармакологии, Преддипломная, НИР.

1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины

9 семестр

Код и наименование компетенции		
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины (уровень сформированности индикатора (компетенции))	
Общепрофессиональные компетенции		
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.	Знать:	Современные компьютерные технологии и методы компьютерного конструирования лекарств.
	Уметь:	Проводить анализ химических данных с использованием современных компьютерных технологий и методов компьютерного конструирования лекарств.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):	Анализа химических данных с использованием современных компьютерных технологий и методов компьютерного конструирования лекарств.
ОПК-7.ИД2 – Осуществляет поиск информации с использованием информационно-коммуникационных технологий и ресурсов биоинформатики для решения профессиональной деятельности.	Знать:	Основные базы данных химических соединений, принципы анализа данных, методы и компьютерные программы, применяемые в компьютерного конструирования лекарств.
	Уметь:	Работать с базами данных химических соединений и соответствующими компьютерными программами в системно биологических исследованиях.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):	Работы с базами данных химических соединений и соответствующими компьютерными программами в системно биологических исследованиях.
ПК-13 - Способен использовать методы компьютерного конструирования лекарств для поиска и создания новых лекарственных веществ		
ПК-13. ИД1 – Планирует исследование, направленное на поиск и создание новых лекарственных веществ	Знать:	Основные этапы поиска и создания новых лекарственных веществ и место применения компьютерного конструирования лекарств.
	Уметь:	Планировать проведения исследований в области компьютерного конструирования лекарств
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):	Планирования исследования, направленного на поиск и создание новых лекарственных веществ.
ПК-13. ИД2 - Создает обучающие и тестовые выборки для построения моделей связи «структура-активность» на основе компьютерных программ и ресурсов хемоинформатики.	Знать:	Принципы создания обучающих и тестовых выборок для построения моделей связи «структура-активность» на основе компьютерных программ и ресурсов хемоинформатики.
	Уметь:	Создавать обучающие и тестовые выборки для построения моделей связи «структура-активность» на основе компьютерных программ и ресурсов хемоинформатики.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):	Создания обучающих и тестовых выборок для построения моделей связи «структура-активность» на основе компьютерных программ и ресурсов хемоинформатики.
ПК-13. ИД3 - Создает и проверяет качество	Знать:	Подходы и методы создания и проверки качества классификационных и количественных моделей связи

классификационных и количественных моделей связи «структура-активность».		«структура-активность».
	Уметь:	Создавать и проверять качество классификационных и количественных моделей связи «структура-активность».
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):	Создания и проверки качества классификационных и количественных моделей связи «структура-активность».
ПК-13.ИД4 – Использует методы компьютерного конструирования лекарств для виртуального поиска, создания или оптимизации новых эффективных и безопасных лекарственных веществ с необходимым ADMET профилем	Знать:	Методы компьютерного конструирования лекарств для виртуального поиска, создания или оптимизации новых эффективных и безопасных лекарственных веществ с необходимым ADMET профилем.
	Уметь:	Применять методы компьютерного конструирования лекарств для виртуального поиска, создания или оптимизации новых эффективных и безопасных лекарственных веществ с необходимым ADMET профилем.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями):	Применения методов компьютерного конструирования лекарств для виртуального поиска, создания или оптимизации новых эффективных и безопасных лекарственных веществ с необходимым ADMET профилем.

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>	54											54		
Лекционное занятие (ЛЗ)	18											18		
Семинарское занятие (СЗ)	32											32		
Практическое занятие (ПЗ)														
Практикум (П)														
Лабораторно-практическое занятие (ЛПЗ)														
Лабораторная работа (ЛР)														
Клинико-практические занятия (КПЗ)														
Специализированное занятие (СПЗ)														
Комбинированное занятие (КЗ)														
Коллоквиум (К)	4											4		
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>	54											54		
Подготовка к учебным аудиторным занятиям	54											54		
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	108										108		
	в зачетных единицах: ОТД (в часах):36	3										3		

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-7.ИД1 ОПК-7.ИД2 ПК-13.ИД1 ПК-13.ИД2 ПК-13.ИД3 ПК-13.ИД4	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. Методы поиска химических соединений в базах данных. Сходство химических соединений и понятие «activity cliff». Основные методы и подходы анализа связи «структура-свойство». (Q)SAR. Deskriptory химических соединений. Методы машинного обучения, используемые при построении взаимосвязи «структура-активность». Валидация (Q)SAR моделей. KNIME.
2.	ОПК-7.ИД1 ОПК-7.ИД2 ПК-13.ИД1 ПК-13.ИД2 ПК-13.ИД3 ПК-13.ИД4	Раздел 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов	Компьютерные программы и интернет ресурсы, используемые для оценки фармакологических и физико-химических свойств лекарственно-подобных соединений. Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов и взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарственного вещества. Компьютерная оценка ADME свойств в зависимости от структуры лекарственного вещества. Компьютерная оценка межлекарственного взаимодействия. Биоизостеризм. Влияние заместителей на свойства соединений. Оптимизация структур.
3.	ОПК-7.ИД1 ОПК-7.ИД2 ПК-13.ИД1 ПК-13.ИД2 ПК-13.ИД3 ПК-13.ИД4	Раздел 3. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий. Методы 3D-QSAR. Создание фармакофоров и фармакофорный поиск. Молекулярная динамика. Валидация моделей белков. 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/ форма промежуточной аттестации	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименование разделов (модулей) (при наличии). Порядковые номера и наименование тем (модулей) модулей. Темы учебных занятий.	Количество часов контактной работы	Виды текущего контроля успеваемости**	Формы текущего контроля успеваемости					
					РЗ	ОУ	КП	ТЭ		
9 семестр										
Раздел 1. Хемоинформатика			22							
1.1	ЛЗ	Введение в хемоинформатику. Форматы представления структур химических соединений. Идентификаторы структур.	2	Д			+			
1.2	ЛЗ	Алгоритмы поиска по структуре соединений. Базы данных химических, лекарственных и природных соединений.	2	Д			+			
1.3	ЛЗ	Создание моделей связи «структура-свойство»	2	Д			+			
1.4	СЗ	Рисование структур химических соединений в химическом редакторе Marvin Applet. Конвертация различных форматов представления структур химических соединений в OpenBabel.	2	Т	+		+			
1.5	СЗ	Создание обучающих и тестовых выборок для анализа связи «структура-свойство» в Datawarrior	2	Т	+		+			
1.6	СЗ	Базы данных PubChem и ChEMBL, DrugBank, Zink, BindingDB, ChemIDplus, ClinicalTrials.gov	2	Т	+		+			
1.7	СЗ	Построение и оценка моделей связи «структура-активность». Компьютерная программа GUSAR	2	Т	+		+			
1.8	СЗ	Работа с KNIME. Построение классификационной модели для прогноза мутагенности	2	Т	+		+			
1.9	СЗ	Использование KNIME для создания QSAR моделей	2	Т	+		+			
1.10	СЗ	Биоизостеризм	2	Т	+		+			
1.11	К	Коллоквиум по модулю 1	2	Р	+		+			
Раздел 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов			12							
2.1	ЛЗ	Компьютерная оценка побочных эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями, АДМЕ, межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества.	2	Д			+			
2.2	ЛЗ	Поиск лекарственных мишеней. Базы данных мишеней лекарственных соединений.	2	Д			+			
2.3	СЗ	Компьютерная оценка токсических эффектов на основе структуры лекарства.	2	Т	+		+			

2.4	СЗ	Компьютерная оценка адсорбции, распределения, метаболизма, выведения и межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества.	2	Т	+		+			
2.5	СЗ	Компьютерная оценка фармакологических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарства.	2	Т	+		+			
2.6	СЗ	Базы данных мишеней лекарственных соединений.	2	Т	+		+			
Раздел 3. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени			20							
2.1	ЛЗ	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий.	2	Д	+					
2.2	ЛЗ	Взаимодействие белок-лиганд.	2	Д	+					
2.3	ЛЗ	Методы 3D-QSAR. Создание фармакофоров и фармакофорный поиск.	2	Д	+					
2.4	ЛЗ	Моделирование трехмерной структуры белка. Процедуры оптимизации и уточнение моделей.	2	Д	+					
2.5	СЗ	Создание и поиск фармакофора в базе данных трехмерных структур	2	Т	+	+				
2.6	СЗ	Построение 3D-QSAR с CoMFA моделей.	2	Т	+	+				
2.7	СЗ	Введение в AutoDock Vina	2	Т	+	+				
2.8	СЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina. (часть 1)	2	Т	+	+				
2.9	СЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina. (часть 2)	2	Т	+	+				
2.10	К	Коллоквиум по модулю 1, 2	2	Р	+		+			
Всего за семестр:			54							
Всего по дисциплине:			54							

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 обучающимися знаний, умений и опыта практической деятельности по темам (разделам, модулям) дисциплины
------------------------------	----------	---	---

5.3.2. Структура текущего контроля успеваемости по дисциплине

9 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
Практическое занятие	СЗ	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Практическая задача	ОУ	В	Т	10	0	1
Коллоквиум	К	Контроль присутствия	КП	П	Д	1	0	0
		Опрос устный	ОУ	В	Р	30	0	1
		Тестирование	ОП	В	Р	20	0	1

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

9 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
Max 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

9 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

9 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 зачета, 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 обучающемуся следует изучить учебный материал по теме занятия или отдельным значимым учебным вопросам, по которым будет осуществляться опрос.

Для подготовки к текущему рубежному (модульному) контролю обучающемуся 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. Лаб. знаний, 2015. – 322 с. – Режим доступа:		http://www.studmedlib.ru/cgi-bin/mb4x?usr_data=access(2m

	http://marc.rsmu.ru:8020/marcweb2/Default.asp	ed,0YI8ELM67 04SLM6S- 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> – портал электронных образовательных ресурсов
2. <http://www.elibrary.ru> – сайт научной электронной библиотеки
3. www.studmedlib.ru – сайт электронной библиотеки студента «Консультант студента»
4. <http://mon.gov.ru> – сайт Минобрнауки РФ
5. <http://www.edu.ru/> – библиотека федерального портала «Российское образование» (содержит каталог ссылок на интернет-ресурсы, электронные библиотеки по различным вопросам образования)
6. <http://www.prilib.ru> – сайт Президентской библиотеки
7. <http://www.rusneb.ru> – сайт национальной электронной библиотеки
8. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
9. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
10. <http://www.drugbank.ca/>
11. <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
12. <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/>
13. <https://clinicaltrials.gov/>
14. <http://www.chemspider.com/>
15. <http://zinc.docking.org/>
16. <http://www.rlsnet.ru/>
17. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>
18. <http://bidd.nus.edu.sg/group/cjttd/>
19. <http://bidd.nus.edu.sg/group/drt/dart.asp>
20. <http://www.genome.jp/kegg/>
21. https://mcule.com/apps/1-click-docking/?utm_source=ccl&utm_medium=maillist&utm_campaign=1-click-docking
22. <http://www.way2drug.com>
23. <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 (KNIME, AutoDock Vina).
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)	11
6.	Организация промежуточной аттестации обучающихся	13
7.	Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)	13
8.	Методические указания обучающимся по освоению дисциплины (модуля)	13
9.	Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	14