

Документ подписан простой электронной подписью Информация о владельце: ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич Должность: Ректор Дата подписания: 04.04.2025 13:48:12 Уникальный программный ключ: 04c19ed8bfbb	МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ») Факультет фундаментальной медицины Кафедра общей и клинической патологии	
	Рабочая программа дисциплины " Компьютерное конструирование лекарственных препаратов " по направлению подготовки (специальности) 30.05.01 Медицинская биохимия направленности (профилю) Медицинская биохимия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 1



УТВЕРЖДАЮ

Проректора по учебной работе

/ В.Е.Федоров

» августа 2020 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)*
Компьютерное конструирование лекарственных препаратов

Направление подготовки (специальность)

30.05.01 Медицинская биохимия

Направленность (профиль)

Медицинская биохимия

Присваиваемая квалификация (степень)

Врач-биохимик

Форма обучения

очная

Год(ы) набора 2020

*Рабочая программа дисциплины (модуля) адаптирована для инклюзивного обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Челябинск 2020 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля) принята:

Ученым советом факультета фундаментальной медицины

Протокол заседания № 1 от «14» июля 2020 г.

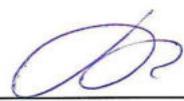
Председатель ученого совета факультета фундаментальной медицины _____  О. Б. Цейликман

Секретарь ученого совета факультета фундаментальной медицины _____  Н. В. Мальцева

Рабочая программа дисциплины (модуля) одобрена и рекомендована кафедрой общей и клинической патологии

Протокол заседания № 5 от «14» июля 2020 г.

Заведующий кафедрой _____  Д. Б. Сумная

Автор (составитель) д.х.н., профессор _____  Белик А.В.

Структура рабочей программы соответствует приказу ректора ФГБОУ ВО «ЧелГУ» от «05» декабря 2018 г. № 678-1

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре ОПОП
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля)
5. Структура и содержание дисциплины (модуля)
6. Фонд оценочных средств
 - 6.1. Перечень видов оценочных средств
 - 6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации
 - 6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации
 - 6.4. Критерии оценивания
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)
 - 7.1. Рекомендуемая литература
 - 7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"
 - 7.3. Перечень информационных технологий
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Специальные условия освоения дисциплины обучающимися с инвалидностью и ограниченными возможностями здоровья

Рабочая программа дисциплины "Компьютерное конструирование лекарственных препаратов" по направлению подготовки (специальности) "Медицинская биохимия" направленности (профилю) Медицинская биохимия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 4
---	--------

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью дисциплины "Компьютерное конструирование лекарственных препаратов" является 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.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

Цикл (раздел) ОПОП:	Б1.В.1.02
2.1 Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
Клиническая фармакология	
Фармакология	
Информатика и основы информационной безопасности	
Органическая химия	
Молекулярная физиология	
Физическая химия	
Биохимическая и функциональная роль БАВ в организме	
Молекулярная биология	
2.2 Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
Фармакогеномика	
Преддипломная практика	
Научно-исследовательская практика (научно-исследовательская работа)	
Медицинские биотехнологии	

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ОПК-1: готовностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием информационных, библиографических ресурсов, медико-биологической терминологии, информационно-коммуникационных технологий и учетом основных требований информационной безопасности

Знать:
базы данных биополимеров и инструменты в них встроенные; базы данных биологически активных соединений для скрининга; сайты компаний, разрабатывающих программное обеспечение для дизайна лекарственных препаратов.
Уметь:
анализировать базы данных с биополимерами, фильтровать библиотеки для скрининга; находить нужное программное обеспечение.
Владеть:
навыками поиска информации о строении малых и больших молекул в базах данных.

ОПК-5: готовностью к использованию основных физико-химических, математических и иных естественнонаучных понятий и методов при решении профессиональных задач

Знать:
основную терминологию и методы, применяемые в молекулярном моделировании и конструировании лекарственных средств.
Уметь:
понимать мануалы к программному обеспечению, используемому для дизайна лекарственных средств.
Владеть:
навыками применения, таких терминов как лидер, лиганд, докинг, дескриптор, формакофор и таких методов как оптимизация конформации по энергии, выравнивание последовательностей и др.

ОПК-6: готовностью к медицинскому применению лекарственных препаратов и иных веществ и их комбинаций при решении профессиональных задач

Знать:
основные требования, предъявляемые к лекарственным препаратам, такие как биодоступность, нетоксичность,

Рабочая программа дисциплины "Компьютерное конструирование лекарственных препаратов" по направлению подготовки (специальности) "Медицинская биохимия" направленности (профилю) Медицинская биохимия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 5
---	--------

фармакологическая активность, возможные формы лекарственных препаратов и пути их доставки.

Уметь:

оценить фармакологическую активность и биодоступность лекарственного препарата.

Владеть:

навыками составления алгоритмов выбора рациональной фармакотерапии пациентов, нуждающихся в оказании медицинской помощи, учитывая структуры молекул действующих веществ.

ПК-12: способностью к определению новых областей исследования и проблем в сфере разработки биохимических и физико-химических технологий в здравоохранении

Знать:

основные проблемы, имеющие место при молекулярном моделировании лекарственных препаратов.

Уметь:

оценивать возможности использования лекарственных средств для фармакотерапии; проводить поиск по вопросам фармакологии, используя источники информации.

Владеть:

навыками прогнозирования возможного взаимодействия лекарственных средств при комбинированном применении различных препаратов.

ПК-13: способностью к организации и проведению научных исследований, включая выбор цели и формулировку задач, планирование, подбор адекватных методов, сбор, обработку, анализ данных и публичное их представление с учетом требований информационной безопасности

Знать:

последовательность разработки лекарственных препаратов, основные алгоритмы, подходы и методы. Ограничения используемых методов, возможные источники ошибок.

Уметь:

Выбирать адекватные методы для эффективного поиска лекарственного средства, в зависимости от первоначальных условий: известна ли структура мишени, есть ли препараты с аналогичной фармакологической активностью.

Владеть:

навыками применения научной методологии, методами обработки и анализа данных и их представлений.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1	Знать:
3.1.1	основные приемы и методы компьютерного молекулярного моделирования и конструирования с разработки новых лекарственных средств; основные программы и инструменты, используемые для разработки лекарственных средств.
3.2	Уметь:
3.2.1	разбираться в инструментах и программах, применяемых для молекулярного моделирования лекарственных препаратов.
3.3	Владеть:
3.3.1	использования основных инструментов в программах, применяемых для дизайна лекарственных средств.

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость	5 ЗЕТ
Часов по учебному плану : 180 в том числе : аудиторные занятия : 92 самостоятельная работа : 70 часов на контроль : 18	Виды контроля в семестрах: экзамены 10

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Литература
	Раздел 1. Этапы разработки лекарственных препаратов.			
1.1	Этапы разработки лекарственных средств. Отличия российской и зарубежной регуляторной практик. Фармацевтическая разработка. Предпосылки для поиска новых лекарственных препаратов. /Лек/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5

Рабочая программа дисциплины "Компьютерное конструирование лекарственных препаратов" по направлению подготовки (специальности) "Медицинская биохимия" направленности (профилю) Медицинская биохимия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»				стр. 6
1.2	Поиск и конструирование лигандов, действующих на конкретную молекулярную мишень. Поиск активных лигандов путем экспериментального скрининга. Дизайн веществ de novo. Дизайн веществ на основе структуры макромолекулы-мишени. Дизайн веществ на основе структуры лигандов. Прогноз на основе анализа структурного сходства. /Лек/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
1.3	Построение моделей фармакофоров. Прогнозирование спектров биологической активности фармакологических веществ. Веб-сервисы для прогнозирования биологической активности и других свойств фармакологических веществ. Прогнозирование ADMET характеристик. /Лек/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1 Э2 Э3 Э4
1.4	Биохимические базы данных. Изучение интерфейса программ квантово-химических визуализаторов. Chemcraft, Gauss View, Mercury. /Пр/	9	4	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
1.5	Биохимические базы данных. Визуализатор Discovery Studio Visualizer. /Ср/	9	4	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э2
Раздел 2. Моделирование малых молекул.				
2.1	Химическое пространство. Виды химического пространства: пространство на дескрипторах, на графах, на функциях, облако точек. Навигация в химическом пространстве дескрипторов. Проекция химического пространства для визуализации. Алгоритмы проекции (общая идея): PCA, SOM, GTM. Генерация трехмерных координат. Рентгеноструктурные данные. Библиотеки фрагментов. Преобразование двумерных структур в трехмерные. /Лек/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.2	Расчет энергии диссоциации двухатомной молекулы и энергии связи многоатомной молекулы. /Пр/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.3	Расчет энергии молекулы фтороводорода в программе Gaussian, GAMESS. /Пр/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.4	Изучение главного окна программы Gaussian и опций директивы Optimization Z-Matrix, Restart, MaxCycle = N. /Пр/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.5	Квантово-механические методы. Неэмпирические (ab initio) методы. Полуэмпирические методы молекулярных орбиталей. Комбинированные методы квантовой и молекулярной механики. /Лек/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.6	История вопроса. Методы ВС и МО. Метод Хюккеля. Практические приложения метода. Интерпретация результатов и их значение. Метод ППП. /Пр/	9	4	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.7	Полуэмпирические методы CNDO, INDO, MINDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO и др. Их особенности, варианты параметризаций, возможности применений и программные продукты. /Пр/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.8	Построение молекулярных орбиталей двух- и трехатомных молекул. /Пр/	9	4	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.9	Конформационный анализ методом систематического поиска, методом Монте-Карло, молекулярной динамики. /Лек/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.10	Вычислительные методы оптимизации геометрии. Оптимизация геометрии. Методы минимизации энергии. /Лек/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.11	Сканирование поверхности потенциальной энергии. /Пр/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5

Рабочая программа дисциплины "Компьютерное конструирование лекарственных препаратов" по направлению подготовки (специальности) "Медицинская биохимия" направленности (профилю) Медицинская биохимия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»				стр. 7
2.12	Фармакофорный поиск. Совмещение молекул, атомов, полей. /Ср/	9	6	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.13	Потенциалы молекулярных взаимодействий. Молекулярный электростатический потенциал. Методы расчета частичных атомных зарядов. Методы расчета МЭП. Поля молекулярного взаимодействия. Вычисление полей с помощью программы GRID. Гидрофобные взаимодействия. Отображение свойств на молекулярную поверхность. /Лек/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.14	Расчет порядков связей в молекулах углеводов. /Пр/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.15	Методы 3D-QSAR. Метод CoMFA. Построение модели. Статистическое качество. /Пр/	9	4	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.16	Молекулярная динамика с использованием пакета NAMD. /Пр/	9	4	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.17	Знакомство с программами Chemcraft, ViewMol3D, Molekel. /Ср/	9	6	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1
2.18	Проведение неэмпирического расчета молекул в минимальном базисе и химическая интерпретация полученных результатов; Сравнение точности расчета неэмпирическими методами в программе HyperChem. /Ср/	9	6	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.19	Метод сравнительного анализа индексов молекулярного подобия (comsia). /Пр/	10	4	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
2.20	Методы 3D QSAR, не зависящие от выравнивания. /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
Раздел 3. Моделирование белков				
3.1	Моделирование белков по гомологии. Методы выравнивания последовательностей. Идентификация и моделирование консервативных областей. Конструирование переменных областей. Моделирование боковых цепей. Метод дистанционной геометрии. Предсказание вторичной структуры. Методы протягивания. /Лек/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э2 Э4
3.2	Процедуры оптимизации. Уточнение модели. Молекулярная динамика. /Лек/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
3.3	Валидация моделей белков. Стереохимическая корректность. Качество упаковки. Анализ достоверности укладки. /Лек/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
3.4	Поиск с использованием множественного выравнивания. /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э4
3.5	Просмотр структур в программе Discovery studio viewer pro. Анализ структуры дисульфидных связей в ингибиторе трипсина (PDB ID 2R33). /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
3.6	Работа с программными продуктами Molsoft. /Пр/	9	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
3.7	Построение карт Рамачандрана. Определение альфа-спиралей и бета-структур в белке. /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
3.8	Моделирование белок-белкового взаимодействия. /Ср/	10	20	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5

Рабочая программа дисциплины "Компьютерное конструирование лекарственных препаратов" по направлению подготовки (специальности) "Медицинская биохимия" направленности (профилю) Медицинская биохимия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»				стр. 8
3.9	Определение аминокислот в центре связывания и в каталитическом центре. Сравнение последовательностей инструментом Fasta. /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
3.10	Машинное обучение. Ансамблевые методы: бэггинг, бустинг и стекинг. Бутстрэп. /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
Раздел 4. Виртуальный скрининг и докинг				
4.1	Виртуальные библиотеки доступные для скрининга: Подготовка библиотеки соединений. Гибкость белка. Гибкость лиганда. /Лек/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э1
4.2	Алгоритмы докинга. Методы постепенного конструирования. Генетические алгоритмы. Табу-поиск. Моделирование отжига и метод Монте-Карло. Методы подгонки формы. /Лек/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
4.3	Оценочные функции. Фильтрация результатов виртуального скрининга по топологическим свойствам, с помощью консенсусных подходов, с помощью комбинированных вычислительных процедур, по химическому разнообразию. /Лек/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
4.4	Области применения и ограничения молекулярного докинга. Докинг в полярные центры связывания, содержащие молекулы воды. Докинг в центры связывания, содержащие кофактор. Влияние таутомерии на результаты докинга. /Лек/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
4.5	Программы для молекулярной стыковки: AutoDock, GROMACS. Докинг с использованием сервиса Swiss Dock. /Пр/	10	6	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5 Э2 Э3
4.6	Подготовка библиотек. Удаление противоионов с использованием форматов smiles и smarts. /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
4.7	Конформационный анализ. /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
4.8	PyMOL /Пр/	10	2	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
4.9	Сравнение различных методов докинга и оценки. Примеры успешного применения виртуального скрининга. /Ср/	10	13	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5
4.10	Подготовка к экзамену. /Ср/	10	15	Л1.1 Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

6.1. Перечень видов оценочных средств

Текущая аттестация: устный опрос, ситуационные задачи.
Промежуточная аттестация: вопросы для экзамена.

6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации

Пример вопросов для устного опроса:

1. Что такое глобальное выравнивание последовательностей?
2. Что такое локальное выравнивание последовательностей?
3. В чём заключается поиск мотивов совпадения при выравнивании последовательностей?
4. Что такое множественное выравнивание?
5. Как проявляются инверсные и палиндромные последовательности в точечных матрицах сходства?
6. Как проявляются инсерции и делеции в точечных матрицах сходства?
7. Какой вид аннотации множественного выравнивания использует программа ClustalW?
8. Что такое профиль выравнивания?
9. В чём преимущество программы PSI-BLAST по сравнению с профилями выравниваний?
10. В чём преимущество метода скрытых марковских моделей?
11. Какие расчеты называются неэмпирическими?

12. В чем заключаются достоинства полуэмпирических методов по сравнению с неэмпирическими ?
13. В чем специфика неограниченного метода Хартри-Фока (unrestrictedHF (UHF))?
14. В чем специфика ограниченного метода Хартри-Фока (restrictedHF (RHF))?
15. Методы теории функционала плотности.
16. В чем заключаются преимущества метода DFT по сравнению с неэмпирическими?
17. Что представляет собой корреляционно-согласованный базисный набор в методе DFT?
18. Понятие поверхности потенциальной энергии.
19. Привести пример ППЭ. Дать обоснованные комментарии.
Пример ситуационной задачи:
Используя матрицу замен аминокислот BLOSUM62 и фиксированный штраф за пропуски d | 8, методом Нидлмана-Вунша построить глобальное выравнивание двух фрагментов (и вычислить его счёт (вес))
YFPHF DLS
YFENFRELQD

6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации

Пример вопросов для экзамена:

1. Химическое пространство.
 - пространство на дескрипторах,
 - пространство на графах,
 - на функциях,
 - облако точек
2. Химическое пространство дескрипторов. Алгоритмы:
 - PCA,
 - SOM,
 - GTM.
3. Улучшение качества молекулярных моделей.
 - Слабый и сильный метод обучения
 - Консенсусные подходы.
 - Ансамблевое обучение.
 - Методы: бэггинг, бустинг, стэкинг, использование случайного поднабора, бутстрэп.
4. Способы борьбы с переобучением
 - Y-scrambling
 - скользящий контроль
 - контроль по блокам
 - внешний и внутренний тестовый набор
 - трехвыборочный подход.
5. Фармакофорное отображение
 - с полным перебором конформеров
 - с использованием клики
 - с использованием генетического алгоритма.

6.4. Критерии оценивания

Критерием успешности освоения учебного материала является экспертная оценка преподавателя, учитывающая регулярность посещения лекционных, семинарских и лабораторных занятий, знаний теоретического раздела программы по дисциплине (в том числе материала самостоятельной работы), которые оцениваются устным опросом по вопросам дисциплины и по качеству решения ситуационных задач.

Оценка устного ответа студента занятию:

Оценка «отлично» выставляется студенту, если он владеет понятийным аппаратом, демонстрирует глубину и полное овладение содержанием учебного материала, в котором легко ориентируется; дал полный ответ и показал глубокие знания по каждому из вопросов.

Оценка «хорошо» выставляется студенту, за умение грамотно излагать материал, но при этом содержание и форма ответа могут иметь отдельные неточности;

Оценка «удовлетворительно» выставляется, если студент обнаруживает знания и понимание основных положений учебного материала, но излагает его неполно, непоследовательно, допускает неточности в определении понятий, не умеет доказательно обосновывать свои суждения;

Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если студент имеет разрозненные, бессистемные знания, не умеет выделять главное и второстепенное, допускает ошибки в определении понятий, искажает их смысл.

Критерии оценки решения ситуационной задачи:

5 «отлично» – комплексная оценка предложенной ситуации; знание теоретического материала с учетом междисциплинарных связей, правильный выбор тактики действий; последовательное, уверенное выполнение практических манипуляций; оказание неотложной помощи в соответствии с алгоритмами действий;

4 «хорошо» – комплексная оценка предложенной ситуации, незначительные затруднения при ответе на теоретические вопросы, неполное раскрытие междисциплинарных связей; правильный выбор тактики действий; логическое обоснование теоретических вопросов с дополнительными комментариями преподавателя; последовательное, уверенное выполнение практических манипуляций; оказание неотложной помощи в соответствии

Рабочая программа дисциплины "Компьютерное конструирование лекарственных препаратов" по направлению подготовки (специальности) "Медицинская биохимия" направленности (профилю) Медицинская биохимия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 10
<p>с алгоритмами действий;</p> <p>3 «удовлетворительно» – затруднения с комплексной оценкой предложенной ситуации; неполный ответ, требующий наводящих вопросов педагога; выбор тактики действий в соответствии с ситуацией возможен при наводящих вопросах преподавателя, правильное последовательное, но неуверенное выполнение манипуляций; оказание неотложной помощи в соответствии с алгоритмами действий;</p> <p>2 «неудовлетворительно» – неверная оценка ситуации; неправильно выбранная тактика действий, приводящая к ухудшению ситуации, нарушению безопасности пациента; неправильное выполнение практических манипуляций.</p> <p>Промежуточная аттестация проводится по окончании 10 семестра в форме экзамена. Экзамен проводится в виде устного собеседования по вопросам к экзамену.</p> <p>Оценка устного ответа обучающегося на экзамене:</p> <p>Оценка «отлично» ставится, если обучающийся показал глубокое знание вопроса; полно, аргументировано, последовательно ответил по учебному материалу.</p> <p>Оценка «хорошо» ставится, если обучающийся показал знание вопроса, но допускает ряд неточностей; полно, аргументировано, последовательно ответил по учебному материалу.</p> <p>Оценка «удовлетворительно» ставится, если обучающийся показал знание вопроса, но допускает множество неточностей; имеет проблемы с полнотой, аргументацией, последовательностью изложения учебного материала.</p> <p>Оценка «неудовлетворительно» ставится, если обучающийся не знает материал вопроса или имеет поверхностные знания и не может полно, аргументировано, последовательно ответить по учебному материалу.</p>	

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)				
7.1. Рекомендуемая литература				
7.1.1. Основная литература				
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л1.1	Краснюк И.И.	Биофармация, или основы фармацевтической разработки, производства и обоснования дизайна лекарственных форм: учебное пособие (https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455593.html)	Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020	ЭБС
Л1.2	Хельтье Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г.	Молекулярное моделирование: теория и практика (https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001017240.html)	Москва : Лаборатория знаний, 2020	ЭБС
7.1.2. Дополнительная литература				
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л2.1	Полковникова Ю. А., Провоторова С. И.	Технология изготовления и производства лекарственных препаратов (https://e.lanbook.com/book/103081)	Санкт-Петербург : Лань, 2018	ЭБС
Л2.2	Андрианов А. М., Малахова Г. В.	Конформационный анализ белков: теория и приложения (https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=142264)	Минск : Белорусская наука, 2013	ЭБС
Л2.3	Бутырская Е. В.	Компьютерная химия. Основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView: монография (https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=226995)	Москва : СОЛОН-ПРЕСС, 2011	ЭБС
Л2.4	Стефанов В. Е., Тулуб А. А., Мавропуло-Столяренко Г. Р.	Биоинформатика: учебник для вузов (https://urait.ru/bcode/450856)	Москва : Юрайт, 2020	ЭБС
Л2.5	Часовских Н.Ю.	Биоинформатика: учебник (https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970455425.html)	Москва : ГЭОТАР-Медиа, 2020	ЭБС
7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"				
Э1	редактор молекул онлайн https://molview.org/?cid=2519			
Э2	База данных белков https://www.rcsb.org/			
Э3	Сервис позволяющий предсказывать взаимодействие между выбранным белком и малой молекулой http://swissdock.ch/			
Э4	Инструмент для поиска сходных биологических последовательностей blast.ncbi.nlm.nih.gov			
Э5	Сайт Европейского института биоинформатики https://www.ebi.ac.uk/pdbe/			
7.3 Перечень информационных технологий				
7.3.1 Программное обеспечение				
MS Office365				
Adobe Reader				

Рабочая программа дисциплины "Компьютерное конструирование лекарственных препаратов" по направлению подготовки (специальности) "Медицинская биохимия" направленности (профилю) Медицинская биохимия ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 11
LMS Moodle	
7.3.2 Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы	
Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (https://elibrary.ru/defaultx.asp?) eLIBRARY.RU : научная электронная библиотека : сайт. – Москва, 2000 – . – URL: https://elibrary.ru . – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный	
Национальная электронная библиотека (НЭБ) (https://rusneb.ru/) Национальная электронная библиотека (НЭБ) : объединенный электронный каталог фондов российских библиотек : сайт. – URL: http://нэб.рф . – Режим доступа: из читальных залов библиотеки ЧелГУ. – Текст : электронный.	
Справочно-правовая система «КонсультантПлюс» (http://www.consultant.ru/) КонсультантПлюс : справочно-правовая система : база данных / Региональный центр правовой информации Информправо. – Москва, 1992 – . – Режим доступа: из читальных залов библиотеки. – Текст : электронный.	

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Лекционные занятия проводятся в лекционных аудиториях. Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования (ноутбук, проектор, экран, колонки) и учебно-наглядных пособий (презентации по всем разделам дисциплины).
Для проведения семинарских занятий в университете аудитория оборудована компьютерами с программным обеспечением, мультимедийным комплексом и экраном для демонстрации слайдовых презентаций и видеоматериалов.
Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета, куда каждый обучающийся в течение всего периода обучения обеспечен индивидуальным неограниченным доступом.

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Основными видами самостоятельной работы студентов являются: работа с бумажными источниками информации (конспектом, книгой, методическими указаниями), работа с источниками сети Интернет и теми программными продуктами, которые рекомендованы преподавателем. Изучать курс рекомендуется по темам в соответствии с программой дисциплины равномерно в течение всего семестра. Не следует переходить к изучению последующей темы, пока материал предыдущей темы не усвоен. Изучать материал, относящийся к данной теме, следует по одному или нескольким из рекомендованных учебников. Для поиска необходимых сведений в учебнике можно использовать предметный указатель в конце книги. При изучении материала по конспектам лекций следует обращать внимание на приводимые в лекциях ссылки сети Интернет. Студенту следует больше “экспериментировать” с ними, изучать справочную систему, различные возможности и сервисы соответствующих сайтов. Особое внимание необходимо уделять англоязычным ресурсам, поскольку подавляющее большинство научной информации публикуется на английском языке. При знакомстве с подобными ресурсами не следует “бояться” английского языка, при наличии затруднений желателно пользоваться онлайн переводчиками и/или словарями. Перед осуществлением любого поиска информации следует тщательно продумывать стратегию: внимательно подходить к выбору ключевых слов, заранее продумывать их логические комбинации, знакомиться со справочной системой того или иного инструмента поиска и т.д. В процессе поиска необходимо обращать внимание на релевантность выдаваемых в процессе поиска документов. При поиске информации в реферативных базах данных желателно запоминать/записывать фамилии авторов работающих по интересующей студента тематике и осуществлять поиск других работ данных авторов. После каждого поиска необходимо детально фиксировать информацию о найденных документах (указывать когда искали, где искали, какие ключевые слова использовали и т.д.).

10. СПЕЦИАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ОБУЧАЮЩИМИСЯ С ИНВАЛИДНОСТЬЮ И ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ
Освоение дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с использованием специальных технических средств и голо информационных технологий, предоставляемых Ресурсным учебно-методическим центром по обучению инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья ЧелГУ по запросу обучающегося. 1. Мобильные специальные технические средства для лиц с нарушениями зрения: портативный компьютер с вводом/выводом шрифтом Брайля с синтезатором речи «EIBraile-W14J G2»; ноутбуки с программной экранной доступа NVDA; электронные увеличители для удаленного просмотра; видеувеличители портативные; тифлоплеер; цифровые диктофоны. 2. Мобильные специальные технические средства для лиц с нарушениями слуха: система свободного звукового поля со встроенной совместимостью с FM-устройствами; радиоклассы «Сонет-PCM» с передатчиком,

заушным индуктором и индукционной петлей; система информационная для слабослышащих переносная «Исток» А2 со встроенным плеером – звуковым информатором; документ-камера; программируемые слуховые аппараты индивидуального пользования.

3. Ассистивные информационные технологии: программное обеспечение экранного доступа с синтезом речи NVDA; программы экранного увеличения; программы речевого синтеза для компьютеров и ноутбуков; программы речевого синтеза для мобильных устройств; экранная клавиатура; экранная лупа.

При необходимости для обучающихся с нарушениями зрения на рабочих местах для проведения практических или лабораторных занятий устанавливается специальное программное обеспечение (программа речевой навигации NVDA, речевые синтезаторы, экранные лупы).

В учебные аудитории обеспечивается беспрепятственный доступ для обучающихся инвалидов и обучающихся с ограниченными возможностями здоровья. В каждой аудитории, где обучаются инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, предусматривается соответствующее количество мест для обучающихся с учетом нарушений их здоровья.

Для освоения дисциплины инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется доступ к печатным источникам, имеющимся в научной библиотеке ЧелГУ, с помощью специальных технических средств; доступ к электронным источникам, представленным в форме электронного документа в фонде научной библиотеки ЧелГУ или электронно-библиотечных системах, с помощью специальных технических и программных средств (рабочее место для незрячего пользователя с программным обеспечением экранного доступа с синтезом речи NVDA, рабочее место с компьютерным роллером и клавиатурой Clevy с большими кнопками и с разделяющей клавиши накладкой).

Учебно-методические материалы для обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла,
- в печатной форме шрифтом Брайля.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа,
- в форме аудиофайла.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья освоение дисциплины может быть частично или полностью осуществлено с использованием дистанционных образовательных технологий (Moodle, Adobe Connect Pro и пр.).

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья используется индивидуальная работа. Под индивидуальной работой подразумевается две формы взаимодействия с преподавателем: индивидуальная учебная работа (консультации), т.е. дополнительное разъяснение учебного материала и углубленное изучение материала с теми обучающимися, которые в этом заинтересованы, и индивидуальная воспитательная работа. Индивидуальные консультации направлены на индивидуализацию обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или обучающимся с ограниченными возможностями здоровья.

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине обеспечивается выполнение следующих дополнительных требований в зависимости от индивидуальных особенностей, обучающихся:

- а) инструкция по порядку проведения процедуры оценивания предоставляется в доступной форме (устно, в письменной форме, в письменной форме шрифтом Брайля, устно с использованием услуг сурдопереводчика);
- б) доступная форма предоставления заданий оценочных средств (в печатной форме, в печатной форме увеличенным шрифтом, в печатной форме шрифтом Брайля, в форме электронного документа, задания зачитываются ассистентом, задания предоставляются с использованием сурдоперевода);
- в) доступная форма предоставления ответов на задания (письменно на бумаге, набор ответов на компьютере, письменно шрифтом Брайля, с использованием услуг ассистента, устно).

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями. Эти средства могут быть предоставлены ЧелГУ или могут использоваться собственные технические средства. При необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на задания, процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Проведение процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья допускается с использованием дистанционных образовательных технологий.