

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ
проф. Таюрский Д.А.

"__" _____ 20__ г.

Программа дисциплины

Компьютерные методы в медицинской химии

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Медицинская химия

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) ведущий научный сотрудник, д.н. (доцент) Балакин К.В. (научно-исследовательская лаборатория по разработке лекарственных средств, НОЦ фармацевтики), KVBalakin@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3	должен обладать готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3).
ОПК-1	должен обладать способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
ПК-2	должен обладать владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен демонстрировать способность и готовность:

- Использовать современный инструментарий компьютерной химии для конструирования молекул, обладающих направленным мишень-специфическим действием, оптимальными физико-химическими, фармакокинетическими и токсическими свойствами;
- использовать публично доступные и коммерческие специализированные базы данных химико-биологической и библиографической информации в качестве основы для разработки мишень-специфичных библиотек соединений и получения обучающих выборок для QSPR-анализа;
- использовать специальные методы конструирования структур, такие как фармакофорный дизайн, методы молекулярного подобия и другие для создания новых соединений, обладающих свойствами исходных молекул-прототипов;
- использовать современные методы QSPR-моделирования для построения моделей, связывающих целевые фармакологически значимые свойства с расчетными молекулярными дескрипторами;
- использовать современные методы молекулярного моделирования, такие как 3D-фармакофорное моделирование и молекулярный докинг, для конструирования новых молекулярных структур с направленным мишень-специфичным профилем;
- анализировать специализированную литературу в области компьютерного дизайна лекарств и применять на практике полученные знания.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ОД.3 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Медицинская химия)" и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 1 курсе в 1 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) на 72 часа(ов).

Контактная работа - 30 часа(ов), в том числе лекции - 18 часа(ов), практические занятия - 12 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 42 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 1 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Введение в дисциплину	1	2	0	0	10
2.	Тема 2. Молекулярные дескрипторы	1	4	4	0	10
3.	Тема 3. Основы анализа количественной связи структура - свойство (QSPR-анализа)	1	8	4	0	12
4.	Тема 4. Методы молекулярного моделирования	1	4	4	0	10
<p>4.2 Содержание дисциплины (модуля)</p> <p>Тема 1. Введение в дисциплину Компьютерный дизайн лекарств. История возникновения. Основные цели и задачи. Основные технологии и подходы, сферы их применения, особенности, ограничения. Ключевые понятия и определения. Связь с другими современными технологиями разработки лекарств - комбинаторным синтезом и биологическим скринингом.</p> <p>Тема 2. Молекулярные дескрипторы Молекулярные дескрипторы. Типы дескрипторов, кодируемая ими информация. 1D и 2D-дескрипторы. 3D-дескрипторы. Необычные дескрипторы. Программы для расчета дескрипторов. Методы отбора дескрипторов для QSAR-моделирования. Методы-фильтры. Оболочечные методы. Генетический алгоритм. Анализ чувствительности.</p> <p>Тема 3. Основы анализа количественной связи структура - свойство (QSPR-анализа) Поиск количественной связи структура - свойство (QSPR). Ключевые алгоритмы и подходы. Построение регрессионных моделей. Искусственные нейронные сети. Построение классификационных моделей. Области применения подходов. Создание обучающих выборок для QSAR-моделирования. Базы данных химико-биологической информации. Библиографические базы данных. Проблемы существующих баз данных. Методы проецирования для QSAR-моделирования. Теоретические основы. Карты Кохонена. Нелинейные карты Сэммона. Примеры практического применения. Достоинства и ограничения.</p> <p>Тема 4. Методы молекулярного моделирования Методы молекулярного моделирования. 3D-представление молекулярной структуры. 3D-фармакофорное моделирование. Способы создания 3D-фармакофорных отображений и гипотез. Молекулярный докинг: основные понятия и технологии, присущие ограничения, основные современные программы. Теоретические и прикладные аспекты, сфера применения.</p>						

Тема 2. Молекулярные дескрипторы

Молекулярные дескрипторы. Типы дескрипторов, кодируемая ими информация. 1D и 2D-дескрипторы. 3D-дескрипторы. Необычные дескрипторы. Программы для расчета дескрипторов. Методы отбора дескрипторов для QSAR-моделирования. Методы-фильтры. Оболочечные методы. Генетический алгоритм. Анализ чувствительности.

Тема 3. Основы анализа количественной связи структура - свойство (QSPR-анализа)

Поиск количественной связи структура - свойство (QSPR). Ключевые алгоритмы и подходы. Построение регрессионных моделей. Искусственные нейронные сети. Построение классификационных моделей. Области применения подходов. Создание обучающих выборок для QSAR-моделирования. Базы данных химико-биологической информации. Библиографические базы данных. Проблемы существующих баз данных. Методы проецирования для QSAR-моделирования. Теоретические основы. Карты Кохонена. Нелинейные карты Сэммона. Примеры практического применения. Достоинства и ограничения.

Тема 4. Методы молекулярного моделирования

Методы молекулярного моделирования. 3D-представление молекулярной структуры. 3D-фармакофорное моделирование. Способы создания 3D-фармакофорных отображений и гипотез. Молекулярный докинг: основные понятия и технологии, присущие ограничения, основные современные программы. Теоретические и прикладные аспекты, сфера применения.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;

- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

База данных по биомедицинской литературе (Medline, США) - <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed>

Научная электронная библиотека ELibrary - <http://elibrary.ru/>

Поисковая библиографическая система ScienceDirect - <http://www.sciencedirect.com/>

Поисковая система по научной литературе Google Scholar - <https://scholar.google.ru/>

Система библиографического цитирования Scopus - <http://www.scopus.com/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	Просмотрите конспект сразу после занятий и отметьте материал, который вызывает затруднения для понимания. Попытайтесь найти ответы на затруднительные вопросы, используя рекомендуемую литературу. Если самостоятельно не удалось разобраться в материале, сформулируйте вопросы и обратитесь за помощью к преподавателю на консультации или ближайшей лекции.
практические занятия	Перед посещением практического занятия изучите теорию вопроса, предполагаемого к изучению, ознакомьтесь с руководством по соответствующей теме. Также рекомендуется прорешать типовые задания, предложенные преподавателем ранее на лекции. Выпишите вопросы, вызвавшие затруднения, и обратитесь за помощью к преподавателю.

Вид работ	Методические рекомендации
самостоятельная работа	<p>Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:</p> <ul style="list-style-type: none"> - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям, устным опросам, тестированиям и контрольной работе; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, защите практической работы, сдаче экзамена. <p>Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины, а также из иных источников, рекомендованных преподавателем. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.</p>
зачет	<p>Зачет может проводиться в письменной и устной формах. Подготовка проводится по лекционному материалу, также используется основная и дополнительная литература. Рекомендуется дополнительно просмотреть материалы семинарских занятий. На зачете необходимо продумать план ответа и четко изложить материал, дать определение основных понятий, дать краткое описание явлений, привести примеры.</p>

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;

- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;

- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;

- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;

- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Медицинская химия".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ОД.3 Компьютерные методы в медицинской химии

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Медицинская химия

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Основная литература:

1. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек . Казань : [Казанский университет], 2013 . ; 20.[Ч. 1]: Компьютерное представление химических структур . 2013 . 173 с.
2. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек . Казань : [Казанский университет], 2013 ; 20.Ч. 2: Химические базы данных / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т . Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .- 185 с.
3. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек . Казань : [Казанский университет], 2013 . ; 20.Ч. 3: Моделирование 'структура-свойство' / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т . - Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .- 302 с.
4. Маджидов Т.И. Хемоинформатика и молекулярное моделирование: дистанционный курс для студентов бакалавриата и магистратуры направления подготовки: 020100 'Химия' [Электронный ресурс]. Площадка 'Зилант' СУО КФУ, 2013. Режим доступа: <http://zilant.kpfu.ru/course/view.php?id=376>

Дополнительная литература:

1. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. [Электронный ресурс] / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 384 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/156>
2. Уилсон, К. Принципы и методы биохимии и молекулярной биологии [Электронный ресурс] : учебное пособие / К. Уилсон, Д. Уолкер ; под ред. А.В. Левашова, В.И. Тишкова ; пер. с англ. Т.П. Мосоловой, Е.Ю. Бозелек-Решетняк. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 855 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/66244>

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.ОД.3 Компьютерные методы в медицинской химии

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Медицинская химия

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.