

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 Б1.В.03

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: 2019

Автор(ы): Балакин К.В.

Рецензент(ы): Маджидов Т.И.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Балакин К. В.

Протокол заседания кафедры No ___ от "___" _____ 20__ г.

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ___ от "___" _____ 20__ г.

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Место дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования
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
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
 - 6.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы и форм контроля их освоения
 - 6.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания
 - 6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы
 - 6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
 - 7.1. Основная литература
 - 7.2. Дополнительная литература
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 к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

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 образовательной программы

Выпускник, освоивший дисциплину, должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ современной химии и смежных наук при решении профессиональных задач
ПК-3	Способен анализировать новую научную проблематику, применять методы и средства планирования, организации и проведения научных исследований в выбранной области химии и смежных наук

Выпускник, освоивший дисциплину:

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 подбора 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 в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.03 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Медицинская химия)" и относится к вариативной части. 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

4.2 Содержание дисциплины

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.

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".

Положение от 29 декабря 2018 г. № 0.1.1.67-08/328 "О порядке проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет".

Положение № 0.1.1.67-06/241/15 от 14 декабря 2015 г. "О формировании фонда оценочных средств для проведения текущей, промежуточной и итоговой аттестации обучающихся федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Положение № 0.1.1.56-06/54/11 от 26 октября 2011 г. "Об электронных образовательных ресурсах федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/66/16 от 30 марта 2016 г. "Разработки, регистрации, подготовки к использованию в учебном процессе и удаления электронных образовательных ресурсов в системе электронного обучения федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/11/16 от 25 января 2016 г. "О балльно-рейтинговой системе оценки знаний обучающихся в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

Регламент № 0.1.1.67-06/91/13 от 21 июня 2013 г. "О порядке разработки и выпуска учебных изданий в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"".

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

6.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы и форм контроля их освоения

Этап	Форма контроля	Оцениваемые компетенции	Темы (разделы) дисциплины
Семестр 1			
	Текущий контроль		
1	Письменная работа	ПК-3, ПК-1	1. Введение в дисциплину 2. Молекулярные дескрипторы
2	Контрольная работа	ПК-3, ПК-1	3. Основы анализа количественной связи структура - свойство (QSPR-анализа) 4. Методы молекулярного моделирования
	Зачет	ПК-1, ПК-3	

6.2 Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Форма контроля	Критерии оценивания				Этап
	Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.	
Семестр 1					
Текущий контроль					
Письменная работа	Правильно выполнены все задания. Продемонстрирован высокий уровень владения материалом. Проявлены превосходные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Правильно выполнена большая часть заданий. Присутствуют незначительные ошибки. Проявлен хороший уровень владения материалом. Проявлены средние способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены более чем наполовину. Присутствуют серьезные ошибки. Проявлен удовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены низкие способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены менее чем наполовину. Проявлен неудовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены недостаточные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	1

Форма контроля	Критерии оценивания				Этап
	Отлично	Хорошо	Удовл.	Неуд.	
Контрольная работа	Правильно выполнены все задания. Продемонстрирован высокий уровень владения материалом. Проявлены превосходные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Правильно выполнена большая часть заданий. Присутствуют незначительные ошибки. Продемонстрирован хороший уровень владения материалом. Проявлены средние способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены более чем наполовину. Присутствуют серьезные ошибки. Продемонстрирован удовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены низкие способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	Задания выполнены менее чем наполовину. Продемонстрирован неудовлетворительный уровень владения материалом. Проявлены недостаточные способности применять знания и умения к выполнению конкретных заданий.	2
	Зачтено		Не зачтено		
Зачет	Обучающийся обнаружил знание основного учебно-программного материала в объеме, необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по специальности, справился с выполнением заданий, предусмотренных программой дисциплины.		Обучающийся обнаружил значительные пробелы в знаниях основного учебно-программного материала, допустил принципиальные ошибки в выполнении предусмотренных программой заданий и не способен продолжить обучение или приступить по окончании университета к профессиональной деятельности без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.		

6.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Семестр 1

Текущий контроль

1. Письменная работа

Темы 1, 2

1. История развития, основные технологии и подходы в компьютерном дизайне лекарств.
2. Связь с ключевыми современными технологиями разработки лекарств - комбинаторным синтезом и биологическим скринингом.
3. Типы молекулярных дескрипторов, кодируемая информация.
4. Основные 1D и 2D-дескрипторы
5. Основные 3D-дескрипторы.
6. Необычные молекулярные дескрипторы. Программы для расчета дескрипторов.
7. Методы отбора дескрипторов для QSPR-моделирования. Методы-фильтры.
8. Методы отбора дескрипторов для QSPR-моделирования. Оболочечные методы.
9. Генетический алгоритм.
10. Анализ чувствительности.

2. Контрольная работа

Темы 3, 4

1. Поиск количественной связи структура - свойство (QSPR). Ключевые алгоритмы и подходы.
2. Построение регрессионных QSPR-моделей. Искусственные нейронные сети.
3. Построение классификационных QSPR-моделей. Области применения методов QSPR-моделирования.
4. Методы проецирования для QSPR-моделирования. Теоретические основы. Методы без сохранения дистанции между объектами. Карты Кохонена.
5. Методы проецирования для QSPR-моделирования. Нелинейные карты Сэммона. Примеры практического применения. Область применения и ограничения.
6. Создание обучающих выборок для QSAR-моделирования. Базы данных химико-биологической информации. Библиографические базы данных.
7. Проблемы существующих баз данных.
8. Методы молекулярного моделирования. 3D-представление молекулярной структуры.
9. 3D-фармакофорное моделирование. Теоретические и прикладные аспекты, сфера применения.
10. Молекулярный докинг. Теоретические и практические основы методологии. Примеры исследований.

Зачет

Вопросы к зачету:

1. История развития, основные технологии и подходы в компьютерном дизайне лекарств.
2. Связь с ключевыми современными технологиями разработки лекарств - комбинаторным синтезом и биологическим скринингом.
3. Типы молекулярных дескрипторов, кодируемая информация.
4. Основные 1D и 2D-дескрипторы
5. Основные 3D-дескрипторы.
6. Необычные молекулярные дескрипторы. Программы для расчета дескрипторов.
7. Методы отбора дескрипторов для QSPR-моделирования. Методы-фильтры. Генетический алгоритм.
8. Методы отбора дескрипторов для QSPR-моделирования. Оболочечные методы. Анализ чувствительности.
9. Поиск количественной связи структура - свойство (QSPR). Ключевые алгоритмы и подходы.
10. Построение регрессионных QSPR-моделей. Искусственные нейронные сети.
11. Построение классификационных QSPR-моделей. Области применения методов QSPR-моделирования.
12. Методы проецирования для QSPR-моделирования. Теоретические основы. Методы без сохранения дистанции между объектами. Карты Кохонена.
13. Методы проецирования для QSPR-моделирования. Нелинейные карты Сэммона. Примеры практического применения. Область применения и ограничения.
14. Создание обучающих выборок для QSAR-моделирования. Базы данных химико-биологической информации. Библиографические базы данных.
15. Проблемы существующих баз данных.
16. Методы молекулярного моделирования. 3D-представление молекулярной структуры.
17. 3D-фармакофорное моделирование. Теоретические и прикладные аспекты, сфера применения.
18. Молекулярный докинг. Теоретические и практические основы методологии. Примеры исследований.

6.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

В КФУ действует балльно-рейтинговая система оценки знаний обучающихся. Суммарно по дисциплине (модулю) можно получить максимум 100 баллов за семестр, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов.

Для зачёта:

56 баллов и более - "зачтено".

55 баллов и менее - "не зачтено".

Для экзамена:

86 баллов и более - "отлично".

71-85 баллов - "хорошо".

56-70 баллов - "удовлетворительно".

55 баллов и менее - "неудовлетворительно".

Форма контроля	Процедура оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	Этап	Количество баллов
Семестр 1			
Текущий контроль			
Письменная работа	Обучающиеся получают задание по освещению определённых теоретических вопросов или решению задач. Работа выполняется письменно и сдаётся преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме работы, аналитические способности, владение методами, умения и навыки, необходимые для выполнения заданий.	1	25
Контрольная работа	Контрольная работа проводится в часы аудиторной работы. Обучающиеся получают задания для проверки усвоения пройденного материала. Работа выполняется в письменном виде и сдаётся преподавателю. Оцениваются владение материалом по теме работы, аналитические способности, владение методами, умения и навыки, необходимые для выполнения заданий.	2	25
Зачет	Зачёт нацелен на комплексную проверку освоения дисциплины. Обучающийся получает вопрос (вопросы) либо задание (задания) и время на подготовку. Зачёт проводится в устной, письменной или компьютерной форме. Оценивается владение материалом, его системное освоение, способность применять нужные знания, навыки и умения при анализе проблемных ситуаций и решении практических заданий.		50

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

7.1 Основная литература:

1. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .- Казань : [Казанский университет], 2013 . [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 . 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 . 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. Медицинская информатика [Электронный ресурс] : учебник / В.П. Омельченко, А.А. Демидова. - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2016. 528 с. - <http://www.studmedlib.ru/book/ISBN9785970436455.html>

7.2. Дополнительная литература:

1. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] : учебное пособие / Каплан И.Г. ; под ред. Н. Ф. Степанова ; пер.с англ. Д. С. Безрукова, И. Г. Рябкина. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 397 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94111>
2. Седых, А.Е. Программа 'XCHEM' - использование фрагментов химической структуры для поиска и моделирования химических и биологических свойств [Электронный ресурс] / А.Е. Седых, И. В. Галкина, В. И. Галкин // Ученые записки Казанского государственного университета. Естественные науки. - 2009. - Т. 151. - N1. - 13 с. URL: http://libweb.kpfu.ru/e-journals/1815-6169/2009/151_1/151_1_est_8.pdf
3. Кочелаев, Борис Иванович (д-р физ.-мат. наук ; 1934-) . Квантовая теория : конспект лекций / Б. И. Кочелаев ; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, Каф теорет. физики .- [2-е изд., перераб., доп. и испр.] .- Казань : [Казанский университет], 2013 .- 222 с.
4. 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>

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>
письменная работа	<p>Рекомендации по освоению контрольных и письменных работ:</p> <ul style="list-style-type: none"> - контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю; - ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений; - при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат; - контрольная работа выполняется на листах формата А4; - не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких-либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине; - неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы; - на каждой странице работы необходимо оставлять поля; - в шапке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, группу, направление, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания.
контрольная работа	<p>Рекомендации по освоению контрольных и письменных работ:</p> <ul style="list-style-type: none"> - контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю; - ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений; - при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат; - контрольная работа выполняется на листах формата А4; - не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких-либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине; - неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы; - на каждой странице работы необходимо оставлять поля; - в шапке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, группу, направление, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания.
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)

Освоение дисциплины "Компьютерные методы в медицинской химии" предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

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.

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

Освоение дисциплины "Компьютерные методы в медицинской химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

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 .