

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о.декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Компьютерный дизайн лекарственных веществ

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки (специальность):

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Медицинская химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 августа 2019 г., №1033.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок В-ПД

2. Планируемые результаты обучения по практике, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор достижения - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикаторы достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-3.М Способен выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме	СПК-3.М.1 Грамотно устанавливает корреляции «структура – активность» лекарственных препаратов	Знать: основные приемы анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера Уметь: ориентироваться в многообразии биологических мишеней Уметь: устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью Владеть: основными методами определения соотношения структура-активность
М-СПК-4 Способен к поиску и анализу научной информации по медицинской химии, анализу и обобщению отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования	СПК-4.М.1 Собирает, систематизирует и проводит первичный анализ информации в области медицинской химии	Уметь: собирать, обрабатывать информацию и представлять результаты исследований в сфере медицинской химии
	СПК-4.М.2 Представляет результаты научных исследований в сфере медицинской химии в соответствии с принятыми нормами и правилами	Знать: основные принципы представления научных результатов в сфере медицинской химии Владеть: основными навыками анализа и представления научной информации в сфере медицинской химии Владеть: основными навыками представления полученных результатов исследования в виде отчетов и научных публикаций в сфере медицинской химии

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (19 часов - занятия лекционного типа, 19 часов - занятия семинарского типа, 2 часа на проведение промежуточной аттестации), 32 часа составляет самостоятельная работа учащегося.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.
Обучающийся должен

- **знать** основные естественнонаучные дисциплины в рамках образовательной программы бакалавра; изучение дисциплин данного модуля опирается, главным образом, на теоретических знаниях в области органической химии, неорганической химии и аналитической химии, а также на практических навыках в области аналитической и органической химии
- **уметь** пользоваться химической литературой и современными интернет-ресурсами
- **владеть** базовыми навыками работы с компьютерными программами.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (з.е. / часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа, в т.ч., лабораторные и практические работы	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия и др.)*	Всего	Выполнение домашних заданий, подготовка к лабораторным занятиям	Подготовка докладов, рефератов и т.п.	Всего
Раздел 1. Компьютерное молекулярное моделирование в медицинской химии.	16	4	4				8	4	4	8
Раздел 2. Пространственная структура биологически ак-	16	4	4			(*)	8	4	4	8

тивных соединений.										
Раздел 3. Структура и взаимодействия биомишеней. Направленное конструирование активных структур.	20	6	6				12	4	4	8
Раздел 4. Виртуальный скрининг активных структур.	18	5	5			(*)	10	4	4	8
Промежуточная аттестация	2						2			
Итого	72	19	19			2*	40			32

*Текущий контроль успеваемости проводится в рамках семинарских занятий

Содержание разделов дисциплины «Компьютерный дизайн лекарственных веществ»

Лекции.

Раздел 1. Компьютерное молекулярное моделирование в медицинской химии.

1. Необходимость анализа пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени. Основные методы компьютерного молекулярного моделирования: квантовая и молекулярная механика.
2. Метод молекулярной механики – описание структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля как математическая модель зависимости потенциальной энергии системы от координат атомов. Вклады взаимодействия ковалентно связанных атомов: энергия деформации связей, энергия деформации валентных углов, торсионный потенциал. Учет невалентных взаимодействий лигандов и биомишеней. Электростатическая (кулоновская) энергия, влияние диэлектрической проницаемости среды. Стерическая (ван-дер-ваальсова) энергия. Гидрофобные взаимодействия, локальная липофильность, молекулярный липофильный потенциал. Водородные связи, их зависимость от направления. Взаимодействия π -систем: π -стекинг, π -анионное, π -катионное взаимодействие. Взаимодействие разрыхляющих σ^* -орбиталей с неподеленными парами электронов: галогенное связывание, взаимодействия атома серы. Параметризация силовых полей. Понятие о гибридных методах квантовой и молекулярной механики (QM/MM), их применение для описания ферментативных процессов и других химических реакций с участием биомакромолекул.

3. Конформационное пространство. Поверхность потенциальной энергии, определение оптимальной по энергии конформации. Локальные и глобальные минимумы. Биологически активная конформация. Генерация пространственных структур органических соединений: использование шаблонов конформаций, семплирование торсионных углов по связям со свободным вращением, локальная минимизация. Конформационные библиотеки.
4. Молекулярная динамика. Моделирование микроскопической картины теплового движения системы во времени на основе численного решения уравнений второго закона Ньютона, необходимые для этого вычислительные ресурсы. Понятие о молекулярно-динамической траектории. Применение моделирования молекулярной динамики для исследования конформационного пространства системы и поиска глобального минимума, анализ локализации и устойчивость связывания лигандов, расчет термодинамических параметров, изучение механизма процессов.

Раздел 2. Пространственная структура биологически активных соединений.

1. Анализ связи пространственной структуры молекул и их биоактивности (3D QSAR). Метод сравнительный анализ молекулярных полей CoMFA. Совмещение пространственных структур и семплирование полей межмолекулярного взаимодействия (электростатического и стерического) в узлах трехмерной решетки. Построение предсказательных моделей связи «структура–активность» и их интерпретация. Карты активности. Проблема совмещения пространственных структур и подходы к ее решению. Учет других видов межмолекулярного взаимодействия.
2. Фармакофорные модели. Понятие о двумерных и трехмерных фармакофорах. Фармакофорные центры, отражающие основные виды взаимодействий лигандов с биомишенями. Учет формы молекул. Фармакофорная модель как способ оценки сходства молекулы с известными активными соединениями. Применение фармакофорных моделей для быстрого поиска структур, потенциально способных к взаимодействию с биомишенями.

Раздел 3. Структура и взаимодействия биомишеней. Направленное конструирование активных структур.

1. Структура и функционирование основных мишеней лекарственных веществ. Белки, их первичная, вторичная, третичная и четвертичная структура. Общая структура и механизм функционирования важнейших биомишеней: рецепторы, сопряженные с G-белками, киназы, ионные каналы, вирусные белки слияния.
2. Моделирование пространственной структуры белков. Возможности и ограничения экспериментальных методов исследования пространственной структуры белков. Необходимость моделирования пространственной структуры белков и его отличия от моделирования структуры малых молекул. Метод моделирования белков по гомологии. Выравнивание аминокислотных последовательностей и выбор шаблонов. Построение предварительной модели: перенос координат, мутации, инсерции, делеции, моделирование петель. Оптимизация модели и оценка ее стереохимического качества.
3. Моделирование взаимодействия лиганда и биомишени. Молекулярный докинг – быстрая полуэмпирическая оценка возможности, места и способа связывания с учетом стерических требований и межмолекулярных взаимодействий. Различные подходы к учету изменения конформаций лиганда и мишени при связывании (индуцированного соответствия):

жесткий, гибкий и полужесткий докинг, жесткий докинг конформационных библиотек. Способ связывания. Оценочные функции, подходы к их построению, учет энтальпийных и энтропийных факторов, ограничения оценочных функций. Применение результатов молекулярного докинга. Более точный анализ связывания лигандов с помощью методов молекулярной механики и моделирования молекулярной динамики.

4. Дизайн активных структур на основе информации о структуре биомишени. Центры межмолекулярного взаимодействия, линкерные фрагменты, стерические требования сайта связывания. Дизайн de novo – автоматическое конструирование лигандов «с нуля» в сайте связывания, библиотеки фрагментов, Стратегии связывания и наращивания.
5. Конструирование активных структур на основе информации об известных лигандах. Использование моделей связи «структура–активность». Понятие об обратной задаче в QSAR на примере индекса Рандича. Дизайн перспективных структур на основе информации о вкладах заместителей или фрагментов в активность (метод Фри-Уилсона) или карт активности и селективности, построенных с помощью методов анализа топологии молекулярного поля (MFTA) или сравнительного анализ молекулярных полей (CoMFA). Более точная оценка предложенных структур путем прогнозирования по полной модели в рамках процедуры виртуального скрининга.

Раздел 5. Виртуальный скрининг активных структур.

1. Виртуальный скрининг как вероятностный процесс отбора перспективных структур среди множества доступных соединений, его ограничения. Этапы виртуального скрининга. Источники библиотек структур: интуиция исследователя, базы данных доступных соединений, базы данных возможных соединений, генерация структур. Преимущества и ограничения различных источников. Предварительный отбор структур без учета информации о целевой активности. Грубая оценка перспективности дальнейших исследований соединения исходя из предшествующего опыта. Исключение токсифорных и других нежелательных групп. Отбор соединений, похожих на лекарства, правила Липински, их интерпретация и уточнение. Подготовка библиотек структур с учетом особенностей конкретной задачи: стандартизация представления, определение состояния протонирования, зарядов, конформаций и т.д.
2. Поиск потенциально активных соединений на основе информации о структуре лигандов и биомишеней. Построение процедуры виртуального скрининга с учетом оптимизации вычислительных затрат и особенностей конкретной мишени, задачи и имеющихся данных. Виртуальный скрининг на основе информации о структуре известных лигандов: прогнозирование активности с помощью моделей связи «структура–активность», оценка соответствия фармакофорным моделям. Виртуальный скрининг на основе информации о структуре мишени: молекулярный докинг, моделирование взаимодействия лиганда и мишени. Формирование фокусированной библиотеки перспективных структур и ее анализ.
3. Характеристики качества виртуального скрининга. Вероятностный характер процесса классификации активных и неактивных структур, истинные и ложные положительные и отрицательные результаты, ошибки 1-го и 2-го рода. Распределение активных и неактивных соединений по величине оценок, подходы к выбору пороговых значений, баланс

ошибок. Общая точность распознавания, чувствительность, специфичность. ROC-кривая, параметр площади под кривой AUROC. Коэффициент обогащения, понятие о раннем обогащении, эффективность процедуры виртуального скрининга.

Семинарские занятия.

Семинарские занятия по курсу проводятся в конце семестра и представляют собой своеобразные **литературные конференции**. Для каждого семинарского занятия семестра студенты (2–3 чел.) готовят и представляют доклад по статье из ведущих научных журналов по медицинской химии (см. список рекомендуемой литературы) за последние пять лет, посвященной методам компьютерного дизайна лекарственных веществ и их применению для решения конкретных задач поиска и оптимизации соединений-лидеров, действующих на определенные биомишени. Доклад представляется устно, после чего проводится обсуждение темы статьи всеми студентами и преподавателем. Примерное распределение по темам следующее.

Семинары 1. Подходы к прогнозированию фармакокинетических свойств и токсичности при виртуальном скрининге лекарственных веществ.

Семинары 2. Компьютерный дизайн противоопухолевых средств.

Семинары 3. Компьютерный дизайн модуляторов нейрорецепторов.

Семинары 4. Компьютерный дизайн ингибиторов ферментов.

6. Образовательные технологии:

-применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;

-использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;

-преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Самостоятельная работа студентов состоит в проработке лекционного материала, подготовке к контрольным работам, выполнению домашних заданий, подготовке к лекционному докладу, а также подготовке к экзамену.

Примерный перечень видов работ, проводимых самостоятельно:

- Работа с лекционным материалом по теме: «Компьютерное молекулярное моделирование в медицинской химии».
- Работа с лекционным материалом по теме: «Пространственная структура биологически активных соединений».
- Работа с лекционным материалом по теме: «Структура и взаимодействия биомишеней».
- Работа с лекционным материалом по теме: «Направленное конструирование активных структур».
- Работа с лекционным материалом по теме: «Виртуальный скрининг активных структур».

- Выполнение домашних заданий в рамках подготовки к литературной конференции с дискуссией.
- Подготовка к контрольной работе.
- Подготовка к зачёту

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Хельтге Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г. Молекулярное моделирование. Теория и практика. М.: Бином, 2013.
2. Специальный выпуск «Количественные соотношения "структура-активность" и молекулярное моделирование», Российский Химический Журнал, 2006, Т. 50, № 2 (11 обзорных статей, электронная версия <http://www.chem.msu.ru/rus/journals/jvho/2006-2/welcome.html>)

Дополнительная литература

Virtual Screening: Principles, Challenges, and Practical Guidelines, ed. C. Sotriffer, Wiley, 2011.

Периодическая литература

1. Journal of Medicinal Chemistry
2. ACS Medicinal Chemistry Letters
3. Bioorganic and Medicinal Chemistry
4. Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters
5. Journal of Chemical Information and Modeling
6. Molecular Informatics
7. SAR and QSAR in Environmental Research
8. Journal of Cheminformatics

Интернет-ресурсы

Сайт с презентациями лекций и семинаров ведущих ученых «Henry Stewart Talks Online Collections». Серия «Introduction to Cheminformatics»: <https://hstalks.com/playlist/582/introduction-to-cheminformatics/>

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: к.х.н., с.н.с Палюлин В.А., к.х.н. с.н.с. Радченко Е.В.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

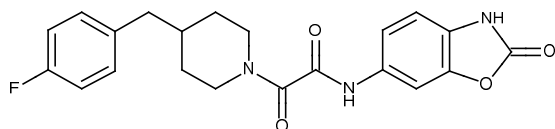
Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

Образец домашнего задания в рамках подготовки к литературной конференции с дискуссией

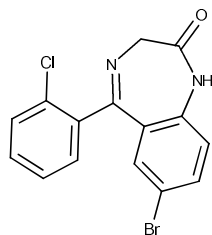
Выполнение домашнего задания состоит из двух этапов. Во-первых, требуется найти статью из ведущих научных журналов по медицинской химии (см. список рекомендуемой литературы) за последние пять лет, посвященную методам компьютерного дизайна лекарственных веществ и их применению для решения конкретных задач поиска и оптимизации соединений-лидеров, действующих на определенные биомишени, внимательно прочитать ее и досконально разобраться в ее содержании. Во-вторых, необходимо подготовить презентацию и краткий доклад по теме данной статьи для представления на литературной конференции.

Образец контрольной работы

Задание 1. По каким связям в следующей структуре возможно свободное вращение?



Задание 2. Какие фармакофорные центры можно выделить в следующей структуре?



Задание 3. Известно, что в сайте связывания биологической мишени присутствует остаток тирозина. Какие структурные фрагменты можно было бы включить в структуру взаимодействующего с этим сайтом лиганда? Ответ поясните.

Промежуточный контроль успеваемости (вопросы к зачёту)

Для аттестации по итогам освоения дисциплины «Компьютерный дизайн лекарственных веществ» предусмотрен зачёт. Зачёт проводится устно и включает в себя ответы на вопросы из перечня:

1. Компьютерное молекулярное моделирование в медицинской химии.

1а. Необходимость анализа пространственной структуры и взаимодействий биологической мишени и активного вещества на молекулярном уровне для понимания механизма действия и направленного конструирования лекарств. Индуцированное соответствие лиганда и мишени. Основные методы компьютерного молекулярного моделирования: квантовая и молекулярная механика.

1б. Метод молекулярной механики – описание структуры и взаимодействия молекул с помощью аппарата классической механики. Силовые поля как математическая модель зависимости потенциальной энергии системы от координат атомов. Вклады взаимодействия ковалентно связанных атомов: энергия деформации связей, энергия деформации валентных углов, торсионный потенциал. Учет невалентных взаимодействий лигандов и биомишеней. Электростатическая (кулоновская) энергия, влияние диэлектрической проницаемости среды. Стерическая (ван-дер-ваальсова) энергия. Гидрофобные взаимодействия, локальная липофильность, молекулярный липофильный потенциал. Водородные связи, их зависимость от направления. Взаимодействия π -систем: π -стекинг, π -анионное, π -катионное взаимодействие. Взаимодействие разрыхляющих σ^* -орбиталей с неподеленными парами электронов: галогенное связывание, взаимодействия атома серы. Параметризация силовых полей. Понятие о гибридных методах квантовой и молекулярной механики (QM/MM), их применение для описания ферментативных процессов и других химических реакций с участием биомакромолекул.

1в. Конформационное пространство. Поверхность потенциальной энергии, определение оптимальной по энергии конформации. Локальные и глобальные минимумы. Биологически активная конформация. Генерация пространственных структур органических соединений: использование шаблонов конформаций, семплирование торсионных углов по связям со свободным вращением, локальная минимизация. Конформационные библиотеки.

1г. Молекулярная динамика. Моделирование микроскопической картины теплового движения системы во времени на основе численного решения уравнений второго закона Ньютона, необходимые для этого вычислительные ресурсы. Понятие о молекулярно-динамической траектории. Применение моделирования молекулярной динамики для исследования конформационного пространства системы и поиска глобального минимума, анализ локализации и устойчивость связывания лигандов, расчет термодинамических параметров, изучение механизма процессов.

2. Пространственная структура биологически активных соединений.

2а. Анализ связи пространственной структуры молекул и их биоактивности (3D QSAR). Метод сравнительный анализ молекулярных полей CoMFA. Совмещение пространственных структур и семплирование полей межмолекулярного взаимодействия (электростатического и стерического) в узлах трехмерной решетки. Построение предсказательных моделей связи «структура–активность» и их интерпретация. Карты активности. Проблема совмещения пространственных структур и подходы к ее решению. Учет других видов межмолекулярного взаимодействия.

2б. Фармакофорные модели. Понятие о двумерных и трехмерных фармакофорах. Фармакофорные центры, отражающие основные виды взаимодействий лигандов с биомишенями. Учет формы молекул. Фармакофорная модель как способ оценки сходства молекулы с известными активными соединениями. Применение фармакофорных моделей для быстрого поиска структур, потенциально способных к взаимодействию с биомишенями.

3. Структура и взаимодействия биомишеней.

3а. Структура и функционирование основных мишеней лекарственных веществ. Белки, их первичная, вторичная, третичная и четвертичная структура. Общая структура и механизм функционирования важнейших биомишеней: рецепторы, сопряженные с G-белками, киназы, ионные каналы, вирусные белки слияния.

3б. Моделирование пространственной структуры белков. Возможности и ограничения экспериментальных методов исследования пространственной структуры белков. Необходимость моделирования пространственной структуры белков и его отличия от моделирования структуры малых молекул. Метод моделирования белков по гомологии. Выравнивание аминокислотных последовательностей и выбор шаблонов. Построение предварительной модели: перенос координат, мутации, инсерции, делеции, моделирование петель. Оптимизация модели и оценка ее стереохимического качества.

3в. Моделирование взаимодействия лиганда и биомишени. Молекулярный докинг – быстрая полуэмпирическая оценка возможности, места и способа связывания с учетом стерических требований и межмолекулярных взаимодействий. Различные подходы к учету изменения конформаций лиганда и мишени при связывании (индуцированного соответствия): жесткий, гибкий и полужесткий докинг, жесткий докинг конформационных библиотек. Способ связывания. Оценочные функции, подходы к их построению, учет энталпийных и энтропийных факторов, ограничения оценочных функций. Применение результатов молекулярного докинга. Более точный анализ связывания лигандов с помощью методов молекулярной механики и моделирования молекулярной динамики.

4. Направленное конструирование активных структур.

4а. Дизайн активных структур на основе информации о структуре биомишени. Центры межмолекулярного взаимодействия, линкерные фрагменты, стерические требования сайта связывания. Дизайн de novo – автоматическое конструирование лигандов «с нуля» в сайте связывания, библиотеки фрагментов, Стратегии связывания и наращивания.

4б. Конструирование активных структур на основе информации об известных лигандах. Использование моделей связи «структура-активность». Понятие об обратной задаче в QSAR на примере индекса Рандича. Дизайн перспективных структур на основе информации о вкладах заместителей или фрагментов в активность (метод Фри-Уилсона) или карт активности и селективности, построенных с помощью методов анализа топологии молекулярного поля (MFTA) или сравнительного анализ молекулярных полей (CoMFA). Более точная оценка предложенных структур путем прогнозирования по полной модели в рамках процедуры виртуального скрининга.

5. Виртуальный скрининг активных структур.

5а. Виртуальный скрининг как вероятностный процесс отбора перспективных структур среди множества доступных соединений, его ограничения. Этапы виртуального скрининга. Источники библиотек структур: интуиция исследователя, базы данных доступных соединений, базы данных возможных соединений, генерация структур. Преимущества и ограничения различных источников. Предварительный отбор структур без учета информации о целевой активности. Грубая оценка перспективности дальнейших исследований соединения исходя из предшествующего опыта. Исключение токсифорных и других нежелательных групп. Отбор соединений, похожих на лекарства, правила Липински, их интерпретация и уточнение. Подготовка библиотек структур с учетом особенностей конкретной задачи: стандартизация представления, определение состояния протонирования, зарядов, конформаций и т.д.

5б. Поиск потенциально активных соединений на основе информации о структуре лигандов и биомолекул. Построение процедуры виртуального скрининга с учетом оптимизации вычислительных затрат и особенностей конкретной мишени, задачи и имеющихся данных. Виртуальный скрининг на основе информации о структуре известных лигандов: прогнозирование активности с помощью моделей связи «структура-активность», оценка соответствия фармакофорным моделям. Виртуальный скрининг на основе информации о структуре мишени: молекулярный докинг, моделирование взаимодействия лиганда и мишени. Формирование фокусированной библиотеки перспективных структур и ее анализ.

5в. Характеристики качества виртуального скрининга. Вероятностный характер процесса классификации активных и неактивных структур, истинные и ложные положительные и отрицательные результаты, ошибки 1-го и 2-го рода. Распределение активных и неактивных соединений по величине оценок, подходы к выбору пороговых значений, баланс ошибок. Общая точность распознавания, чувствительность, специфичность. ROC-кривая, параметр площади под кривой AUROC. Коэффициент обогащения, понятие о раннем обогащении, эффективность процедуры виртуального скрининга.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (до-	Успешное и систематическое умение

			пускает неточности непринципиального характера)	
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: основные приемы анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера Знать: основные принципы представления научных результатов в сфере медицинской химии	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Уметь: ориентироваться в многообразии биологических мишеней Уметь: устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью Уметь: собирать, обрабатывать информацию и представлять результаты исследований в сфере медицинской химии	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Владеть: основными методами определения соотношения структура-активность Владеть: основными навыками анализа и представления научной информации в сфере медицинской химии Владеть: основными навыками представления полученных результатов исследования в виде отчетов и научных публикаций в сфере медицинской химии	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете