

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
Протокол № 4 от 26 мая 2017 г.

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор

 /В.В. Лунин/

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины: **Компьютерный дизайн лекарственных веществ**

Основная цель курса: формирование представлений о методах конструирования структур лекарственных веществ, взаимодействующих с заданными биомишенями. Основу курса составляет описание подходов к моделированию пространственной структуры и взаимодействий молекул лекарственных веществ и биомишеней. Важное место в содержании курса занимает изучение приемов направленного дизайна и виртуального скрининга потенциально активных соединений на основе информации о структуре биомишеней и известных лигандов.

2. Уровень высшего образования – магистратура

3. Направление подготовки - 04.04.01 «Химия»

4. Место дисциплины в структуре ООП: вариативная часть ООП, профессиональный цикл.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)	
Способность выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и	31 (М-СПК-3)	Знать: основные приемы анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера
	У1 (М-СПК-3)	Уметь: ориентироваться в многообразии биологических мишеней

активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме (М-СПК-3)	У2 (М-СПК-3)	Уметь: устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью
	В2 (М-СПК-3)	Владеть: основными методами определения соотношения структура-активность
Способность к поиску и анализу научной информации по медицинской химии, анализу и обобщению отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования (М-СПК-4)	31 (М-СПК-4)	Знать: основные принципы представления научных результатов в сфере медицинской химии
	У1 (М-СПК-4)	Уметь: собирать, обрабатывать информацию и представлять результаты исследований в сфере медицинской химии
	В1 (М-СПК-4)	Владеть: основными навыками анализа и представления научной информации в сфере медицинской химии
	В2 (М-СПК-4)	Владеть: основными навыками представления полученных результатов исследования в виде отчетов и научных публикаций в сфере медицинской химии

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

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов - занятия лекционного типа, 16 часов - занятия семинарского типа, 2 часа - мероприятия текущего контроля успеваемости, 4 часа на проведение промежуточной аттестации), 32 часа составляет самостоятельная работа учащегося, из них.

7. Входные требования для освоения модуля, предварительные условия.

Для полноценного усвоения данного образовательного модуля **необходимо:**

- **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.

8. Аннотация содержания дисциплины (модуля)

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 активных соединений.	17	4	4			1	9	4	4	8
Раздел 3. Структура и взаимодействия биомишеней. Направленное конструирование активных	18	6	4				10	4	4	8

структур.										
Раздел 4. Виртуальный скрининг активных структур.	17	4	4			1	9	4	4	8
Промежуточная аттестация	4						4			
Итого	72	18	16			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 вкладках 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.

Самостоятельное изучение разделов дисциплин

Самостоятельная работа студентов состоит в проработке лекционного материала, выполнении домашних заданий, подготовке к лекционному докладу, а также подготовке к зачёту.

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

9. 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.

10. Ресурсное обеспечение:

Основная литература

1. Хельтье 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. Sottriffer, 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/>

11. Язык преподавания – русский

12. 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

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций в Приложении.
2. Материалы к текущей (контрольные работы, вопросы к коллоквиумам и пр.), промежуточной аттестации (вопросы к экзамену или зачету)

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций в Приложении.
2. Материалы к текущей (контрольные работы, вопросы к коллоквиумам и пр.), промежуточной аттестации (вопросы к экзамену или зачету)

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

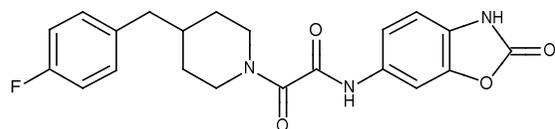
Текущий контроль успеваемости

Образец домашнего задания в рамках подготовки к литературной конференции с дискуссией

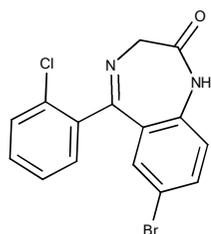
Выполнение домашнего задания состоит из двух этапов. Во-первых, требуется найти статью из ведущих научных журналов по медицинской химии (см. список рекомендуемой литературы) за последние пять лет, посвященную методам компьютерного дизайна лекарственных веществ и их применению для решения конкретных задач 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 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. 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 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.

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.

КАРТА КОМПЕТЕНЦИИ ВЫПУСКНИКА ПРОГРАММЫ МАГИСТРАТУРЫ МГУ

Код и название КОМПЕТЕНЦИИ:

(М-СПК-3) Способность 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

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПЕТЕНЦИИ

Тип КОМПЕТЕНЦИИ:

Специализированная компетенция выпускника программы специалитета по направлению подготовки 04.04.01 Химия.

ПОРОГОВЫЙ (ВХОДНОЙ) УРОВНЬ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, ТРЕБУЕМЫЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся, приступивший к освоению программы магистратуры, 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.
-

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ (М-СПК-3) И КРИТЕРИИ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ

Планируемые результаты обучения	Критерии и показатели оценивания результатов обучения					Оценочные средства
	1	2	3	4	5	
	Неудовлетворительно	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично	
<p>ЗНАТЬ: основные приемы анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера Код 31(М-СПК-3)</p>	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления об основных приемах анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера	В целом успешные, но не систематические представления об основных приемах анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления об основных приемах анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера	Сформированные представления об основных приемах анализа закономерностей «структура – активность» в рядах аналогов соединения-лидера	Контрольные работы, практические задания, рефераты. Форма проверки – устное собеседование на зачёте
<p>УМЕТЬ: ориентироваться в многообразии биологических мишеней Код У1(М-СПК-3)</p>	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения ориентироваться в многообразии биологических мишеней	В целом успешное, но не систематическое умение ориентироваться в многообразии биологических мишеней	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения ориентироваться в многообразии биологических мишеней	Сформированное умение ориентироваться в многообразии биологических мишеней	Контрольные работы, практические задания, рефераты. Форма проверки – устное собеседование на зачёте

<p>УМЕТЬ: устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью Код У2(М-СПК-3)</p>	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью	В целом успешное, но не систематическое умение устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью	Сформированное умение устанавливать взаимосвязь между химической структурой лекарственного препарата и его биологической мишенью	Контрольные работы, практические задания, рефераты. Форма проверки – устное собеседование на зачёте
<p>ВЛАДЕТЬ: основными методами определения соотношения структура-активность Код В2(М-СПК-3)</p>	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков работы с основными теоретическими положениями определения соотношения структура-активность	В целом успешное, но не систематическое применение навыков работы с основными теоретическими положениями определения соотношения структура-активность	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков работы с основными теоретическими положениями определения соотношения структура-активность	Успешное и систематическое применение навыков работы с основными теоретическими положениями определения соотношения структура-активность	Контрольные работы, практические задания, рефераты. Форма проверки – устное собеседование на зачёте

ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИИ У ОБУЧАЮЩЕГОСЯ

Итоговый контроль сформированности компетенции – государственный экзамен, ВКР
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен) согласно учебному плану: зачёт

КАРТА КОМПЕТЕНЦИИ ВЫПУСКНИКА ПРОГРАММЫ МАГИСТРАТУРЫ МГУ

Код и название КОМПЕТЕНЦИИ:

(М-СПК-4) Способность к поиску и анализу научной информации по медицинской химии, анализу и обобщению отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПЕТЕНЦИИ

Тип КОМПЕТЕНЦИИ:

Специализированная компетенция выпускника программы специалитета по направлению подготовки 04.04.01 Химия.

ПОРОГОВЫЙ (ВХОДНОЙ) УРОВНЬ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, ТРЕБУЕМЫЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся, приступивший к освоению программы магистратуры, 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.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ (М-СПК-3) И КРИТЕРИИ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ

Планируемые результаты обучения	Критерии и показатели оценивания результатов обучения					Оценочные средства
	1	2	3	4	5	
	Неудовлетворительно	Неудовлетворительно	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично	
ЗНАТЬ: основные принципы представления научных результатов Код 31(М-СПК-4)	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления об основных принципах представления научных результатов	В целом успешные, но не систематические представления об основных принципах представления научных результатов	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления об основных принципах представления научных результатов	Сформированные представления об основных принципах представления научных результатов	Контрольные работы, практические задания, рефераты. Форма проверки – устное собеседование на зачёте
УМЕТЬ: собирать, обрабатывать информацию и представлять результаты исследований Код У1(М-СПК-4)	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения собирать, обрабатывать информацию и представлять результаты исследований	В целом успешное, но не систематическое умение собирать, обрабатывать информацию и представлять результаты исследований	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения собирать, обрабатывать информацию и представлять	Сформированное умение собирать, обрабатывать информацию и представлять результаты исследований	Контрольные работы, практические задания, рефераты. Форма проверки – устное собеседование

				результаты исследований		е на зачёте
ВЛАДЕТЬ: основными навыками анализа и представления научной информации Код В1(М-СПК-4)	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков анализа и представления научной информации	В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа и представления научной информации	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков анализа и представления научной информации	Успешное и систематическое применение навыков анализа и представления научной информации	Контрольные работы, практические задания, рефераты. Форма проверки – устное собеседование на зачёте
ВЛАДЕТЬ: основными навыками представления полученных результатов исследования в виде отчетов и научных публикаций Код В2(М-СПК-4)	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков представления полученных результатов исследования в виде отчетов и научных публикаций	В целом успешное, но не систематическое применение навыков представления полученных результатов исследования в виде отчетов и научных публикаций	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков представления полученных результатов исследования в виде отчетов и научных публикаций	Успешное и систематическое применение навыков представления полученных результатов исследования в виде отчетов и научных публикаций	Контрольные работы, практические задания, рефераты. Форма проверки – устное собеседование на зачёте

ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИИ У ОБУЧАЮЩЕГОСЯ

Итоговый контроль сформированности компетенции – государственный экзамен, ВКР
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен) согласно учебному плану: зачёт