

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 01.06.2024 12:16:19
Уникальный программный ключ:
ca953a0120d891083f939673078ef1a989dae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»**

Медицинский институт

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КСЕНОБИОТИКОВ

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:

06.04.01 БИОЛОГИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

БИОФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2024 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «QSAR Modeling» входит в программу магистратуры «Биофармацевтический анализ» по направлению 06.04.01 «Биология» и изучается в 3 семестре 2 курса. Дисциплину реализует Кафедра фармацевтической и токсикологической химии. Дисциплина состоит из 4 разделов и 10 тем и направлена на изучение возможностей применения современного моделирования QSAR, методов моделирования и репрезентативного представления молекул лекарственных средств.

Целью освоения дисциплины является формирование компетенций в области QSAR modeling для биофармацевтического применения.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Компьютерное моделирование ксенобиотиков» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	УК-1.2 Уметь осуществлять поиск вариантов решения проблемной задачи на основе доступных и надежных источников информации;
УК-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	УК-2.1 Знать процедуры и механизмы оценки качества проекта, инфраструктурные условия для внедрения результатов проекта; УК-2.2 Уметь разрабатывать концепцию проекта в рамках обозначенной проблемы: формулировка цели, задачи, обоснование актуальности, значимости, ожидаемых результатов и возможных сфер применения;
УК-7	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных.	УК-7.1 Знать основные информационно-поисковые системы и международные базы данных;
ОПК-6	Способен творчески применять и модифицировать современные компьютерные технологии, работать с профессиональными базами данных, профессионально оформлять и представлять	ОПК-6.1 Знает пути и перспективы применения современных компьютерных технологий в биологии, фармации и биомедицине; ОПК-6.2 Умеет работать с профессиональными базами и банками данных в избранной области профессиональной деятельности; ОПК-6.3 Владеет необходимым математическим аппаратом и

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
	результаты новых разработок	навыками анализа и хранения электронных изображений, имеет опыт модификации компьютерных технологий в целях профессиональных исследований;
ОПК-7	Способен в сфере своей профессиональной деятельности самостоятельно определять стратегию и проблематику исследований, принимать решения, в том числе инновационные, выбирать и модифицировать методы, отвечать за качество работ и внедрение их результатов, обеспечивать меры производственной безопасности при решении конкретной задачи	ОПК-7.4 Владеет методами анализа достоверности и оценки перспективности результатов проведенных экспериментов и наблюдений;
ПК-1	Готовность к проведению работ по исследованиям лекарственных средств	ПК-1.2 Умеет осуществлять поиск и анализ регуляторной, научной и научно-технической информации для решения профессиональных задач;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Компьютерное моделирование ксенобиотиков» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Компьютерное моделирование ксенобиотиков».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
УК-7	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих	Атомная и молекулярная спектроскопия в биологии и фармации; Информационно-поисковые системы в биологии, медицине и фармации; Информационные базы данных; Организация экспериментального исследования в биологии, медицине и фармации; Биофармацевтический анализ в решении задач экологической токсикологии; Научно-исследовательская практика в биофармацевтическом анализе; Научно-исследовательская работа;	Научно-исследовательская работа;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	информации и данных.		
УК-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла	Биоэтика; Организация экспериментального исследования в биологии, медицине и фармации; Биофармацевтический анализ в решении задач экологической токсикологии; Информационно-поисковые системы в биологии, медицине и фармации;	
УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	Биоэтика; Введение в биофармацевтический анализ; Информационно-поисковые системы в биологии, медицине и фармации;	Иммуноферментный анализ;
ОПК-6	Способен творчески применять и модифицировать современные компьютерные технологии, работать с профессиональными базами данных, профессионально оформлять и представлять результаты новых разработок	Научно-исследовательская работа; Информационно-поисковые системы в биологии, медицине и фармации; Введение в биофармацевтический анализ;	Научно-исследовательская работа;
ОПК-7	Способен в сфере своей профессиональной деятельности самостоятельно определять стратегию и проблематику исследований, принимать решения, в том числе инновационные, выбирать и модифицировать методы, отвечать за качество работ и внедрение их результатов, обеспечивать меры производственной безопасности при решении конкретной задачи	Организация экспериментального исследования в биологии, медицине и фармации; Физико-химические основы анализа биоматериалов и лекарственных средств; Информационно-поисковые системы в биологии, медицине и фармации; Биофармацевтический анализ в решении задач экологической токсикологии; Научно-исследовательская практика в биофармацевтическом анализе;	Преддипломная практика;
ПК-1	Готовность к проведению работ по исследованиям лекарственных средств	Научно-исследовательская практика в биофармацевтическом анализе; Физико-химические основы анализа биоматериалов и лекарственных средств; Основы биотехнологии; Введение в биофармацевтический анализ; Фармакопейный анализ субстанций и готовых	Преддипломная практика; Основы клинической фармакологии;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
		лекарственных форм; Информационно-поисковые системы в биологии, медицине и фармации; Атомная и молекулярная спектроскопия в биологии и фармации;	

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

** - элективные дисциплины /практики

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «QSAR Modeling» составляет «2» зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			3
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	48		48
Лекции (ЛК)	16		16
Лабораторные работы (ЛР)	32		32
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	18		18
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	6		6
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	72	72
	зач.ед.	2	2

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
Раздел 1	Introduction to QSAR. QSAR tutorials	1.1	Principal Components Analysis Tutorial	ЛК, ЛР
		1.2	Hierarchical Clustering Tutorial. Clustering Methods Tutorial	ЛК, ЛР
		1.3	CoMFA Tutorial. CoMSIA Tutorial. Conformer Columns Tutorial. EVA Tutorial	ЛК, ЛР
Раздел 2	SAMPLS and Advanced CoMFA Tutorials	2.1	SAMPLS Tutorial	ЛК, ЛР
		2.2	Region Focusing Tutorial	ЛК, ЛР
		2.3	Optimizing QSAR Tutorial	ЛК, ЛР
Раздел 3	QSAR Theory	3.1	Concepts Associated With QSAR	ЛК, ЛР
		3.2	CoMFA Theory. CoMSIA Theory	ЛК, ЛР
		3.3	QSAR Techniques	ЛК, ЛР
Раздел 4	QSAR Graphical Interface	4.1	QSAR Command	ЛК, ЛР

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Технические средства: видеопроектор Xiaomi Mijia Laser Projection; Ноутбук Toshiba Satellite A 350-20J; Microsoft Office профессиональный плюс 2007 № RQ6Q2-K4P9M-TK48W-KMK4J-GTDRB; Wundows Vista (TM) Home Premium № 6DG3Y-99KMR-JQMWD-2QJRJ-RJ-RJ34F
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Лазерная установка динамического светорассеяния Zetasizer Nano ZSP производства Malvern Instruments Ltd; Спектрофлуориметр Cary Eclipse производства Agilent Technologies Inc.; Рентгенофлуоресцентный энергодисперсионный спектрометр EDX-7000;

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
		ИК-фурье спектрометр Cary-630 IR; Спектрофотометр Cary-60; Поляриметр цифровой POL-1/2 с контролем температуры по принципу Пельтье
Для самостоятельной работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева, доска магнитно-маркерная

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Ligand-Based Design Manual. QSAR. SYBYL and related Tripos modules © Copyright 1991-1999 Tripos, Inc. pp. 383.

2. Best Practices for QSAR Model Development, Validation, and Exploitation. Alexander Tropsha. DOI: 10.1002/minf.201000061.

Дополнительная литература:

1. Review on: quantitative structure activity relationship (QSAR) modeling. Umma Muhammad, Adamu Uzairu, David Ebuka Arthur. 2018. DOI: 10.15406/japlr.2018.07.00232

2. QSAR Modeling: Where have you been? Where are you going to? 2013, DOI: 10.1021/jm4004285

- <https://www.fkkt.um.si/ukemat/Tropsha-QSPR.pdf>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН

<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru

- ЭБС «Троицкий мост»

2. Базы данных и поисковые системы

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации

<http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>

- поисковая система Google <https://www.google.ru/>

- реферативная база данных SCOPUS

<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при

освоении дисциплины/модуля:*

1. Курс лекций по дисциплине «Компьютерное моделирование ксенобиотиков».

* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система* оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Компьютерное моделирование ксенобиотиков» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН.

РАЗРАБОТЧИКИ:

Доцент кафедры
фармацевтической и
токсикологической химии,
к.фарм.н.

Должность, БУП

Подпись

Колдина Алёна
Михайловна

Фамилия И.О.

Доцент кафедры
фармацевтической и
токсикологической химии,
к.фарм.н.

Должность, БУП

Подпись

Максимова Татьяна
Владимировна

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Заведующий кафедрой
фармацевтической и
токсикологической химии,
д.б.н., профессор

Должность БУП

Подпись

Сыроешкин Антон
Владимирович

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Заведующий кафедрой
фармацевтической и
токсикологической химии,
д.б.н., профессор

Должность, БУП

Подпись

Сыроешкин Антон
Владимирович

Фамилия И.О.