

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский
университет имени Н.И. Пирогова»**

**Министерства здравоохранения Российской Федерации
ФГАОУ ВО РНИМУ им Н.И.Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет)**

Институт биомедицины (МБФ)

УТВЕРЖДАЮ

Директор Института

Прохорчук Егор Борисович

**Доктор биологических наук,
Член-корреспондент
Российской академии наук**

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Б.1.В.В.05.01 Компьютерное конструирование лекарств
для образовательной программы высшего образования - программы специалитета
по специальности**

**30.05.01 Медицинская биохимия
направленность (профиль)**

**Медицинская биохимия
Год начала подготовки - 2021**

Настоящая рабочая программа дисциплины Б.1.В.В.05.01 Компьютерное конструирование лекарств (далее – рабочая программа дисциплины) является частью программы специалитета по специальности 30.05.01 Медицинская биохимия.

Направленность (профиль): Медицинская биохимия.

Форма обучения: очная.

Составители:

№, п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Учёная степень, звание	Должность	Место работы
-----------	---------------------------	---------------------------	-----------	--------------

Рабочая программа дисциплины рекомендована к утверждению рецензентами:

№ п/п	Фамилия, Имя, Отчество	Учёная степень, звание	Должность	Место работы
----------	---------------------------	---------------------------	-----------	--------------

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры

«Кафедра биоинформатики МБФ»

протокол от «___» _____ № _____

Зав. кафедрой

Лагунин Алексей

Александрович

Доктор биологических наук

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена ученым советом

Директор Института

Прохорчук Егор Борисович

Доктор биологических наук,

Член-корреспондент

Российской академии наук

« _____ »

протокол от «___» _____ 20__ № _____

Нормативно-правовые основы разработки и реализации рабочей программы дисциплины:

1. Образовательный стандарт высшего образования ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Министерства здравоохранения Российской Федерации по уровню образования специалитет по специальности 30.05.01 Медицинская биохимия, утвержденный приказом от «29» мая 2020г. № 365 рук.
2. Устав и локальные нормативные акты Университета.
3. Общая характеристика образовательной программы.
4. Учебный план образовательной программы.

© федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова» Министерства здравоохранения Российской Федерации

1. Общие положения

1.1. Цель и задачи освоения дисциплины

1.1.1. Цель: Формирование системных знаний по аспектам связанным с поиском и созданием новых лекарственных веществ, приобретение умений и навыков по основным компьютерным методам, компьютерным программам и базам данных, применяющимся на разных этапах исследования и конструирования лекарственных веществ

1.1.2. Задачи, решаемые в ходе освоения дисциплины:

- Выработать у студентов способности использовать доступные интернет ресурсы для поиска и анализа информации о биологической активности соединений, полученных путем химического и биологического синтеза
- Сформировать основы представления химической информации и анализа зависимости «структура-активность» физиологически активных соединений
- Сформировать системные знания по хемоинформатике, связанных с поиском и созданием новых лекарственных веществ
- Углубленное изучение методов компьютерного конструирования лекарств на основе структуры лигандов
- Формировать представлений о компьютерной фармакологии и токсикологии

1.2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерное конструирование лекарств» изучается в 10 семестре(ах) и относится к части, формируемой участниками образовательного процесса, Блока Б.1 «Дисциплины». Является дисциплиной по выбору.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2.0 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся в рамках образовательной программы должны освоить следующие дисциплины и практики: Органическая химия; Биохимия; Молекулярная фармакология; Теория вероятности и математическая статистика.

Знания, умения и опыт практической деятельности, приобретенные при освоении настоящей дисциплины, необходимы для успешного прохождения практик: Преддипломная, НИР.

1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины

10 семестр

Код и наименование компетенции	
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины

Код и наименование компетенции	
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины
ОПК-6 Способен определять стратегию и проблематику исследований, выбирать оптимальные способы их решения, проводить системный анализ объектов исследования, отвечать за правильность и обоснованность выводов, внедрение полученных результатов в практическое здравоохранение	
ОПК-6.ИД1 Планирует научное исследование.	Знать: Основные подходы, методы и источники данных, используемых в компьютерном конструировании лекарств
	Уметь: Составлять план для создания (Q)SAR моделей, докинга, виртуального скрининга и оптимизации соединений
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): Создания (Q)SAR моделей, проведения докинга, виртуального скрининга и оптимизации соединений.
ОПК-6.ИД2 Анализирует результаты научного исследования.	Знать: Основные математические принципы, алгоритмы, структуры данных, на которых основаны существующие компьютерные программы, используемые в компьютерном конструировании лекарств
	Уметь: Качественно и количественно, оценивать статистическую значимость получаемых результатов
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): Навыками использования основных принципов, алгоритмов и методов используемых в компьютерном конструировании лекарств
ОПК-6.ИД3 Формулирует выводы на основании результатов исследования с оценкой возможности внедрения полученных результатов в практическое здравоохранение.	Знать: Основные задачи и методы компьютерного конструирования лекарств; использование информационных компьютерных систем хранящих информацию о структуре и биологической активности веществ. Принципы формулирования выводов проводимых исследований.
	Уметь: Самостоятельно формулировать выводы на основе результатов исследования в компьютерном конструировании лекарств.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): Формулирования выводов на основе результатов исследования в компьютерном конструировании лекарств.
ОПК-7 Способен обеспечить информационно-технологическую поддержку в области здравоохранения, применять средства информационно-коммуникационных технологий и ресурсы биоинформатики в профессиональной деятельности, выполнять требования информационной безопасности	
ОПК-7.ИД1 Применяет современные информационные технологии и специализированное программное обеспечение для решения профессиональных задач.	Знать: Современные компьютерные технологии и методы компьютерного конструирования лекарств.
	Уметь: Проводить анализ химических данных с использованием современных компьютерных технологий и методов компьютерного конструирования лекарств.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): Анализа химических данных с использованием современных компьютерных технологий и методов компьютерного конструирования лекарств.
ОПК-7.ИД2 Осуществляет поиск информации с использованием информационнокоммуникационных технологий и ресурсов биоинформатики для решения задач профессиональной деятельности.	Знать: Основные базы данных химических соединений, принципы анализа данных, методы и компьютерные программы, применяемые в компьютерного конструирования лекарств.
	Уметь: Работать с базами данных химических соединений и соответствующими компьютерными программами в системно биологических исследованиях.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): Работы с базами данных химических соединений и соответствующими компьютерными программами в системно биологических исследованиях.
ПК-3 Способен разрабатывать и выполнять доклинические исследования (испытания) лекарственных средств для медицинского применения, в том числе биологических лекарственных средств, биомедицинских клеточных продуктов.	
ПК-3.ИД3 ПК-3.ИД3 Выбирает статистические методы для обработки результатов доклинического исследования (испытания) лекарственного средства для медицинского применения, в том числе биологических лекарственных средств, биомедицинских клеточных продуктов.	Знать: Основные идентификаторы и форматы представления структур химических соединений; методы машинного обучения; основные физико-химические свойства; единицы измерения и виды данных описывающих фармакологические свойства лекарственных соединений
	Уметь: Применять методами анализа связи «структура-активность». Оценивать точность полученных моделей и результатов исследований
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): Компьютерными программами DataWarrior, KNIME, GUSAR, PyMol, Autodock, необходимыми для анализа связи «структура-активность»

2.Формы работы обучающихся, виды учебных занятий и их трудоёмкость

Формы работы обучающихся / Виды учебных занятий / Формы промежуточной аттестации		Всего часов	Распределение часов по семестрам
			10
Учебные занятия			
Контактная работа обучающихся с преподавателем в семестре (КРО), в т.ч.:		42	42
Специализированное занятие (СЗ)		26	26
Лекционное занятие (ЛЗ)		12	12
Коллоквиум (К)		4	4
Самостоятельная работа обучающихся в семестре (СРО), в т.ч.:		28	28
Подготовка к учебным аудиторным занятиям		14	14
Иные виды самостоятельной работы (в т.ч. выполнение практических задании проектного, творческого и др. типов)		14	14
Промежуточная аттестация:			
Контактная работа обучающихся в ходе промежуточной аттестации (КРПА), в т.ч.:		2	2
Зачет (З)*		2	2
Общая трудоемкость дисциплины (ОТД)	в часах: ОТД = КРО+СРО+КРПА+СРПА	72	72
	в зачетных единицах: ОТД (в часах): 36	2.00	2.00

* Время для проведения промежуточной аттестации в форме зачёта выделяется в рамках контактной работы (ДВЗ) Проведение промежуточной аттестации в форме зачёта организуется в соответствии с расписанием занятий.

3. Содержание дисциплины

3.1. Содержание разделов, тем дисциплины

10 семестр

№ п /п	Шифр компетенции	Наименование раздела, темы дисциплины	Содержание раздела и темы в дидактических единицах
Раздел 1. Хемоинформатика			
1	ОПК-7.ИД1, ОПК-7.ИД2, ОПК-6.ИД1, ОПК-6.ИД2, ОПК-6.ИД3, ПК-3.ИД3	Тема 1. Хемоинформатика	Основные методы и подходы. Форматы представления структур. Идентификаторы химических соединений. Наиболее известные базы данных (БД) представляющие информацию о структурах и биологической активности химических соединений. Описание химических соединений в (БД), молекулярные отпечатки. Методы поиска химических соединений в базах данных. Сходство химических соединений и понятие «activity cliff». Основные методы и подходы анализа связи «структура-свойство». (Q)SAR. Дескрипторы химических соединений. Методы машинного обучения, используемые при построении взаимосвязи «структура-активность». Валидация (Q)SAR моделей. KNIME
Раздел 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов			
1	ОПК-6.ИД1, ОПК-6.ИД2, ОПК-6.ИД3, ОПК-7.ИД1, ОПК-7.ИД2	Тема 1. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов	Компьютерные программы и интернет ресурсы, используемые для оценки фармакологических и физико-химических свойств лекарственно-подобных соединений. Компьютерная оценка фармакологических и побочных эффектов и взаимодействия с лекарственными мишенями на основе структуры лекарственного вещества. Компьютерная оценка ADME свойств в зависимости от структуры лекарственного вещества.
Раздел 3. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени			
1	ОПК-7.ИД1, ОПК-7.ИД2, ОПК-6.ИД1, ОПК-6.ИД2, ОПК-6.ИД3	Тема 1. Структура белков. Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка.	Методы выравнивания последовательностей. База данных белков UniProt. База данных трехмерных структур белков PDB. Методы и подходы используемые для оценки взаимодействия лигандов с трехмерными структурами белков.

3.2. Перечень разделов, тем дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися

Разделы и темы дисциплины для самостоятельного изучения обучающимися в программе не предусмотрены.

4. Тематический план контактной работы обучающихся с преподавателем при проведении занятий

№ п/п	Виды учебных занятий*	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименования разделов (при наличии), тем, учебных занятий	Количество часов контактной работы	Виды текущего контроля успеваемости**	Формы проведения текущего контроля успеваемости***		
					КП	ОК	РЗ
1	2	3	4	5	6	7	8
10 семестр							
Раздел 1. Хемоинформатика							
Тема 1. Хемоинформатика							
1	ЛЗ	Введение в хемоинформатику. Форматы представления структур химических соединений. Идентификаторы структур.	2	Д	1	1	
2	ЛЗ	Алгоритмы поиска по структуре соединений. Базы данных химических, лекарственных и природных соединений.	2	Д	1	1	
3	ЛЗ	Создание моделей связи «структура-свойство»	2	Д	1	1	
4	СЗ	Рисование структур химических соединений в химическом редакторе Marvin Applet. Конвертация различных форматов представления структур химических соединений в OpenBabel.	2	Т	1	1	1
5	СЗ	Создание обучающих и тестовых выборок для анализа связи «структура-свойство» в Datawarrior	2	Т	1	1	1
6	СЗ	Базы данных PubChem и ChEMBL, DrugBank, Zink, BindingDB, ChemIDplus, ClinicalTrials.gov	2	Т	1	1	1
7	СЗ	Построение и оценка моделей связи «структура-активность». Работа с KNIME. Построение классификационной модели для прогноза мутагенности	2	Т	1	1	1
8	СЗ	Использование KNIME для создания QSAR моделей	2	Т	1	1	1
Раздел 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов							
Тема 1. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов							
9	ЛЗ	Компьютерная оценка побочных эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями, ADME, межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества. Поиск лекарственных мишеней. Базы данных мишеней лекарственных соединений.	2	Д	1	1	1
10	СЗ	Компьютерная оценка адсорбции, распределения, метаболизма, выведения и межлекарственного взаимодействия. Компьютерная оценка токсических эффектов. Компьютерная оценка фармакологических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями.	2	Т	1	1	1
11	СЗ	Компьютерная оценка фармакологических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями.	2	Т	1	1	1
12	К	Коллоквиум по разделу 1,2	2	Р	1	1	1
Раздел 3. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени							
Тема 1. Структура белков. Компьютерный поиск лекарственных соединений на основе оценки их взаимодействия с трехмерной структурой белка.							
13	ЛЗ	Генерация трехмерных координат. Вычислительные методы оптимизации геометрии структур. Конформационный анализ. Потенциалы молекулярных взаимодействий.	2	Д	1	1	1
14	ЛЗ	Взаимодействие белок-лиганд.	2	Д	1	1	1
15	СЗ	Создание и поиск фармакофора в базе данных трехмерных структур.	2	Т	1	1	1
16	СЗ	Исследование связывания лигандов с мутантными белками.	2	Т	1	1	1
17	СЗ	Моделирование белок-белковых взаимодействий	2	Т	1	1	1
18	СЗ	Введение в AutoDock Vina	2	Т	1	1	1
19	СЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina. (часть 1)	2	Т	1	1	1
20	СЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock Vina. (часть 2)	2	Т	1	1	1
21	К	Коллоквиум по разделам 3	2	Р	1	1	1

№ п /п	Виды учебных занятий*	Период обучения (семестр). Порядковые номера и наименования разделов (при наличии), тем, учебных занятий	Количество часов контактной работы	Виды текущего контроля успеваемости**	Формы проведения текущего контроля успеваемости***		
					КП	ОК	РЗ
1	2	3	4	5	6	7	8
22	3	Итоговое занятие	2	ПА	1	1	
		Всего в семестре	44		21	21	18
		Всего по дисциплине	44		21	21	18

(* , ** , *** смотри условные обозначения)

Условные обозначения

Виды учебных занятий*

Виды учебных занятий	Сокращённое наименование	
Лекционное занятие	Лекция	ЛЗ
Специализированное занятие	Специализированное	СЗ
Коллоквиум	Коллоквиум	К

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)**

Виды текущего контроля успеваемости (ВТК)	Сокращённое наименование		Содержание
Текущий дисциплинирующий контроль	Дисциплинирующий	Д	Контроль посещаемости занятий обучающимся
Текущий тематический контроль	Тематический	Т	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме занятия
Текущий рубежный контроль	Рубежный	Р	Оценка усвоения обучающимся знаний, умений и опыта практической деятельности по теме (разделу, модулю) дисциплины

Формы проведения текущего контроля успеваемости обучающихся ***

№	Формы проведения текущего контроля успеваемости обучающихся (ФПТКУ)	Техническое и сокращённое наименование		Возможность проведения текущего контроля успеваемости по видам контроля		
				Д	Т	Р
1	Контроль присутствия	Присутствие	КП	+		
2	Опрос комбинированный	Опрос комбинированный	ОК			+
3	Решение практической (ситуационной) задачи	Практическая задача	РЗ		+	

5. Промежуточная аттестация обучающихся по дисциплине
Оценочные средства промежуточной аттестации

5.1. Формы промежуточной аттестации

Семестр	Форма промежуточной аттестации****	Форма проведения промежуточной аттестации
1	2	3
10 семестр	Зачет	Контроль присутствия, Опрос комбинированный

Условные обозначения ****

Формы промежуточной аттестации	Сокращённое наименование
Зачет	Зачет 3

6. Структура рейтинга по дисциплине

6.1. Обучающийся имеет право пройти промежуточную аттестацию по дисциплине или её части на основании рейтинга успеваемости обучающегося и результатов прохождения текущего рубежного контроля по дисциплине в соответствующем семестре.

6.2. Критерии, показатели проведения текущего контроля успеваемости с использованием балльно-рейтинговой системы (по семестрам и формам промежуточной аттестации)

Рейтинг по дисциплине рассчитывается по результатам текущей успеваемости обучающегося. Тип контроля по всем формам контроля дифференцированный, выставляются оценки по шкале: "неудовлетворительно", "удовлетворительно", "хорошо", "отлично". Исходя из соотношения и количества контролей, рассчитываются рейтинговые баллы, соответствующие системе дифференцированного контроля.

10 семестр

Виды занятий		Формы проведения текущего контроля успеваемости		Кол-во контролей	Макс. кол-во баллов	Соответствие оценок рейтинговым баллам				
						ТК	ВТК	Отл.	Хор.	Удовл.
Специализированное занятие	СЗ	Решение практической (ситуационной) задачи	РЗ	13	312	В	Т	24	16	8
Коллоквиум	К	Опрос комбинированный	ОК	2	702	В	Р	351	234	117
Сумма баллов по дисциплине за семестр					1014					

Критерии выставления оценок при прохождении промежуточной аттестации в форме зачета (на основании рейтинга успеваемости обучающегося и результатов прохождения текущего рубежного контроля по дисциплине (модулю) или её части в семестре)

10 семестр

Шкала оценивания	Критерии выставления оценки
«зачтено»	Рейтинговый балл — не менее 60 % (не менее 600 баллов) и Получение оценки не ниже «удовлетворительно» за прохождение каждого текущего рубежного контроля в семестре
«не зачтено»	Рейтинговый балл — менее 60 % (менее 600 баллов) и/или Получение оценки ниже «удовлетворительно» за прохождение хотя бы одного текущего рубежного контроля в семестре или не прохождение рубежного контроля

7. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

10 семестр

Перечень практических умений и навыков для подготовки к промежуточной аттестации в форме зачёта

Практическое задание:

В качестве основного практического задания будет необходимо в DataWarrior на основе данных из ChEMBL создать SD файл, а потом в KNIME построить workflow для одной из мишеней с использованием, которого необходимо объединить данные для дубликатов структур, перевести значения IC50 из нМ в молярные значения вида pIC50, разделить выборку на обучающую и тестовую выборки в отношении 70:30 и сохранить выборки в SD файлах с информацией о структурах и pIC50. На основе созданных выборок построить количественную зависимость «структура-активность» в GUSAR и оценить точность модели на тестовой выборке (рассчитать R² и RMSE). На основе полученной модели отобрать самое активное вещество из предоставленной в виде SD файла выборки образцов коммерчески доступных химических соединений. Провести поиск отобранного вещества в PubChem на идентичность и сходство. Ответить на вопрос известна ли прогнозируемая активность у найденного соединения или у похожих соединений по экспериментальным данным или патентам. В процессе выполнения задания необходимо сохранить в файле Word количественные характеристики построенной QSAR модели, посчитанные R² и RMSE, наиболее активное по прогнозу соединение (его структуру, идентификатор в базе данных образцов коммерчески доступных химических соединений и PubChem, названия мишеней, с которыми данное соединение или его аналоги активно взаимодействуют).

Образец билета для проведения зачета

ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет)

Кафедра биоинформатики МБФ

Билет № _____

для проведения зачета по дисциплине «Компьютерное конструирование лекарств» по программе специалитета по специальности 30.05.01 Медицинская биохимия направленность (профиль) Медицинская биохимия

Практическое задание:

В качестве основного практического задания будет необходимо в DataWarrior на основе данных из ChEMBL создать SD файл, а потом в KNIME построить workflow для одной из мишеней с использованием, которого необходимо объединить данные для дубликатов структур, перевести значения IC₅₀ из нМ в молярные значения вида pIC₅₀, разделить выборку на обучающую и тестовую выборки в отношении 70:30 и сохранить выборки в SD файлах с информацией о структурах и pIC₅₀. На основе созданных выборок построить количественную зависимость «структура-активность» в GUSAR и оценить точность модели на тестовой выборке (рассчитать R² и RMSE). На основе полученной модели отобрать самое активное вещество из предоставленной в виде SD файла выборки образцов коммерчески доступных химических соединений. Провести поиск отобранного вещества в PubChem на идентичность и сходство. Ответить на вопрос известна ли прогнозируемая активность у найденного соединения или у похожих соединений по экспериментальным данным или патентам. В процессе выполнения задания необходимо сохранить в файле Word количественные характеристики построенной QSAR модели, посчитанные R² и RMSE, наиболее активное по прогнозу соединение (его структуру, идентификатор в базе данных образцов коммерчески доступных химических соединений и PubChem, названия мишеней, с которыми данное соединение или его аналоги активно взаимодействуют).

Кафедра биоинформатики МБФ

Заведующий кафедрой
Лагунин Алексей
Александрович
Доктор биологических наук

8. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины

Методические указания для подготовки к занятиям лекционного типа

Методические указания по порядку проведения текущего контроля успеваемости обучающихся по дисциплине по формам текущего контроля, предусмотренным настоящей рабочей программой дисциплины подготавливаются кафедрой и объявляются преподавателем накануне проведения текущего контроля успеваемости.

Методические указания для подготовки к занятиям специализированного типа

внимательно изучить теоретический материал по конспекту лекции, учебникам, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам

Методические указания для подготовки к коллоквиуму (текущий рубежный контроль)

Для подготовки к текущему рубежному (модульному) контролю обучающемуся следует изучить учебный материал по наиболее значимым темам и (или) разделам дисциплины в семестре

Методические указания для подготовки к зачету

1. Ознакомиться с примером билета, выносимого на промежуточную аттестацию в форме зачета;

2. Проанализировать материал и наметить последовательность его повторения;

3. Определить наиболее простые и сложные темы и (или) разделы дисциплины;

4. Повторить материал по наиболее значимым/сложным темам и (или) разделам дисциплины по конспектам и учебной литературе, а также электронным образовательным ресурсам.

9. Учебно-методическое, информационное и материально-техническое обеспечение дисциплины

9.1. Перечень литературы по дисциплине:

№ п /п	Наименование, автор, год и место издания	Рекомендуется при изучении разделов дисциплины	Количество экземпляров в библиотеке	Электронный адрес ресурса
1	2	3	4	5
1	Химические базы данных. Введение в хемоинформатику: учебное пособие, Маджидов Т. И., 2024 - 2025	Хемоинформатика Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов	80	

9.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», в том числе профессиональных баз данных, необходимых для освоения дисциплины

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», в том числе профессиональных баз данных, необходимых для освоения дисциплины отсутствует.

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

1. MS Windows в редакциях: 7 Pro, 10 Pro, 11 Pro (x86, x64) – лицензия бессрочно
2. MS Office в редакциях: «Standard», «Professional Plus» (2013, 2016, 2019, 2021(x86, x64)) – лицензия бессрочно
3. MS Visio в редакциях: «Professional» (2013, 2016, 2019, 2021(x86, x64)) – лицензия бессрочно
4. Astra Linux Special Edition, вариант лицензирования «Орел», РУСБ.10015-10 – лицензия бессрочно
5. Adobe Acrobat Reader – свободно распространяемое ПО
6. Гарант (справочная правовая система) – лицензия до 31.07.2027
7. FastStone Image Viewer – свободно распространяемое ПО
8. Яндекс Браузер для организаций – свободно распространяемое ПО
9. Платформа «1С:Предприятие 8», конфигурации «1С:Документооборот государственного учреждения», «1С:Университет ПРОФ», «1С:Медицина» – лицензия бессрочно
10. Единая цифровая образовательная среда РНИМУ им. Н.И. Пирогова – собственная разработка РНИМУ
11. МТС Линк платформа для проведения вебинаров – лицензия до 04.07.2027 г.
12. Антивирус Kaspersky endpoint Security – лицензия до 19.09.2027 г.
13. Архиватор 7-Zip – свободно распространяемое ПО
14. Платформа «Kinescore» - лицензия до 11.03.2027 г.
15. Система управления обучением (LMS) – лицензия бессрочная
16. Ubuntu – свободно распространяемое ПО (ОС с открытым исходным кодом)
17. Debian – свободно распространяемое ПО (ОС с открытым исходным кодом)
18. KNIME
19. AutoDock Vina
20. DataWarrior

9.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Каждый обучающийся в течение всего периода обучения обеспечен индивидуальным неограниченным доступом к электронной информационно-образовательной среде университета из любой точки, в которой имеется доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее - сеть «Интернет»), как на территории Университета, так и вне ее.

Электронная информационно-образовательная среда университета обеспечивает:

- доступ к учебному плану, рабочей программе дисциплины, электронным учебным изданиям и электронным образовательным ресурсам, указанным в рабочей программе дисциплины;

- формирование электронного портфолио обучающегося, в том числе сохранение его работ и оценок за эти работы.

Университет располагает следующими видами помещений и оборудования для материально-технического обеспечения образовательной деятельности для реализации образовательной программы дисциплины:

№ п /п	Наименование оборудованных учебных аудиторий	Перечень специализированной мебели, технических средств обучения
1	Аудитория, оборудованная мультимедийными и иными средствами обучения	Компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет», Компьютеры для обучающихся, Стулья, Столы, Проектор мультимедийный, Экран для проектора, Компьютер персональный
2	Помещение для самостоятельной работы обучающихся, оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети Интернет и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации	Учебная мебель (столы, стулья), компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду
3	Учебная аудитория для проведения промежуточной аттестации	Учебная мебель (столы и стулья для обучающихся), стол, стул преподавателя, персональный компьютер; набор демонстрационного оборудования (проектор, экран, колонки)

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения (состав определяется в рабочей программе дисциплины и подлежит обновлению при необходимости). Библиотечный фонд укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 0,25 экземпляра каждого из изданий, указанных в рабочей программе дисциплины, на одного обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих соответствующую дисциплину.

Обучающимся обеспечен доступ (удаленный доступ), в том числе в случае применения электронного обучения, дистанционных образовательных технологий, к современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам, состав которых определяется в рабочей программе дисциплины и подлежит обновлению (при необходимости).

Обучающиеся из числа инвалидов обеспечены печатными и (или) электронными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.