

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 фармации и медицинской химии

УТВЕРЖДАЮ

Директор Института

Негребецкий Вадим
Витальевич

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б.1.О.10 Компьютерное конструирование лекарств
для образовательной программы высшего образования - программы Специалитета
по направлению подготовки (специальности)
33.05.01 Фармация
направленность (профиль)
Фармация

Настоящая рабочая программа дисциплины Б.1.О.10 Компьютерное конструирование лекарств (далее – рабочая программа дисциплины) является частью программы Специалитета по направлению подготовки (специальности) 33.05.01 Фармация. Направленность (профиль) образовательной программы: Фармация.

Форма обучения: очная

Составители:

№	Фамилия, Имя, Отчество	Учёная степень, звание	Должность	Место работы	Подпись
1	Лагунин Алексей Александрович	д.б.н., профессор РАН	заведующий кафедрой биоинформатики Института биомедицины (МБФ)	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет)	
2	Веселовский Александр Владимирович	д.б.н.	заведующий лабораторией структурной биоинформатики	ФГБНУ «Научно- исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича»	
3	Задорожный Антон Дмитриевич		старший преподаватель кафедры биоинформатики Института биомедицины (МБФ)	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет)	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена на заседании кафедры (протокол № _____ от «__» _____ 20__).

Рабочая программа дисциплины рекомендована к утверждению рецензентами:

№	Фамилия, Имя, Отчество	Учёная степень, звание	Должность	Место работы	Подпись
1	Кузиков Алексей Владимирович	к.б.н., доцент	и.о. заведующего кафедрой биохимии Института биомедицины (МБФ)	ФГАОУ ВО РНИМУ им. Н.И. Пирогова Минздрава России (Пироговский Университет)	

Рабочая программа дисциплины рассмотрена и одобрена советом института Институт фармации и медицинской химии (протокол № _____ от «___» _____ 20__).

Нормативно-правовые основы разработки и реализации рабочей программы дисциплины:

1. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования – специалитет по специальности 33.05.01 Фармация, утвержденный приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от «27» марта 2018 г. No 219 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 программы 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 9 семестре (ах) и относится к обязательной части блока Б.1 дисциплины. Является обязательной дисциплиной.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3.0 з.е.

Для успешного освоения настоящей дисциплины обучающиеся должны освоить следующие дисциплины: Иностранный язык; Биологическая химия; Общая и неорганическая химия; Фармацевтическая информатика; Математика; Информационные технологии в профессиональной деятельности провизора; Органическая химия; Фармацевтическая химия.

1.3. Планируемые результаты освоения дисциплины

Семестр 9

Код и наименование компетенции	
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)
ОПК-1 Способен использовать основные биологические, физико-химические, химические, математические методы для разработки, исследований и экспертизы лекарственных средств, изготовления лекарственных препаратов	
ОПК-1ИД4 Применяет математические методы и осуществляет математическую обработку данных, полученных в ходе разработки лекарственных средств, а также исследований и экспертизы лекарственных средств и лекарственного растительного сырья	Знать: основные математические принципы, алгоритмы, структуры данных, на которых основаны существующие компьютерные программы, используемые в компьютерном конструировании лекарств.
	Уметь: анализировать данные о структуре, биологической активности и физико-химическим свойствам лекарственно-подобных соединений.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): навыками вычисления характеристик и оценок характеристик распределения и погрешности измерений; методами обработки текстовой и графической информации; методикой обработки результатов статистических наблюдений с помощью компьютера.
ОПК-6 Способен использовать современные информационные технологии при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности	
ОПК-6ИД3. Применяет специализированное программное обеспечение для математической обработки данных наблюдений и экспериментов при решении задач профессиональной деятельности	Знать: основные математические принципы, алгоритмы, структуры данных, на которых основаны существующие компьютерные программы, используемые в предметной области
	Уметь: качественно и количественно, оценивать статистическую значимость получаемых результатов.
	Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): владеть компьютерными программами, используемыми для анализа химических и биологических данных (DataWarrior, KNIME).

ПК-8 Способен принимать участие в исследованиях лекарственных средств

ПК-8ИД1 проводит исследования по проектированию состава лекарственных препаратов

Знать: - идентификация и форматы представления структур химических соединений; - основные электронные базы данных химических соединений и лекарственных веществ, содержащие информацию об их структуре, свойствах и биологической активности.

Уметь: самостоятельно формулировать задачи для создания моделей «структура-свойство» и планировать проведения виртуального скрининга новых лекарственных веществ.

Владеть практическим опытом (трудовыми действиями): - навыками использования основных принципов, алгоритмов и методов используемых в компьютерном конструировании лекарств; - владеть компьютерными программами, используемыми в компьютерном конструировании лекарств (DataWarrior, KNIME, GUSAR, PyMol, Autodock и др.); - владеть навыками доступа и работы с химическими и лекарственными базами данным (PubChem, ChEMBL, ClinicalTrial.gov, Zinc и др.) через интернет.

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
			9
Учебные занятия			
Контактная работа обучающихся с преподавателем в семестре (КР), в т.ч.:		55	55
Лекционное занятие (ЛЗ)		16	16
Лабораторно-практическое занятие (ЛПЗ)		33	33
Коллоквиум (К)		6	6
Самостоятельная работа обучающихся в семестре (СРО), в т.ч.:		38	38
Подготовка к учебным аудиторным занятиям		14	14
Иные виды самостоятельной работы (в т.ч. выполнение практических заданий проектного, творческого и др. типов)		24	24
Промежуточная аттестация (КРПА), в т.ч.:		3	3
Зачет (З)		3	3
Общая трудоёмкость дисциплины (ОТД)	в часах: ОТД = КР+СРО+КРПА+СРПА	96	96
	в зачетных единицах: ОТД (в часах)/32	3.00	3.00

3. Содержание дисциплины

3.1. Содержание разделов, тем дисциплины

9 семестр

№ п/п	Шифр компетенции	Наименование раздела (модуля), темы дисциплины	Содержание раздела и темы в дидактических единицах
Раздел 1. Хемоинформатика			
1	ОПК-1ИД4, ОПК-6ИД3., ПК-8ИД1	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-1ИД4, ОПК-6ИД3., ПК-8ИД1	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-1ИД4, ОПК-6ИД3., ПК-8ИД1	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 дисциплины.

4.1. Тематический план контактной работы обучающихся с преподавателем.

№ п/п	Виды учебных занятий / форма промеж. аттестации	Период обучения (семестр) Порядковые номера и наименование разделов. Порядковые номера и наименование тем разделов. Темы учебных занятий.	Количество часов контактной работы	Виды контроля успеваемости	Формы контроля успеваемости и промежуточной аттестации		
					КП	ОК	РЗ
1	2	3	4	5	6	7	8
9 семестр							
Раздел 1. Хемоинформатика							
Тема 1. Хемоинформатика							
1	ЛЗ	Введение в хемоинформатику. Форматы представления структур химических соединений. Идентификаторы структур.	2	Д	1		
2	ЛЗ	Алгоритмы поиска по структуре соединений. Базы данных химических, лекарственных и природных соединений.	2	Д	1		
3	ЛЗ	Создание моделей связи «структура-свойство»	2	Д	1		
4	ЛПЗ	Рисование структур химических соединений в химическом редакторе Marvin Applet. Конвертация различных форматов представления структур химических соединений в OpenBabel.	3	Т	1		1
5	ЛПЗ	Создание обучающих и тестовых выборок для анализа связи «структура-свойство» в Datawarrior	3	Т	1		1

6	ЛПЗ	Базы данных PubChem и ChEMBL, DrugBank, Zink, BindingDB, ChemIDplus, ClinicalTrials.gov	3	Т	1		1
7	ЛПЗ	Построение и оценка моделей связи «структура-активность». Работа с KNIME. Построение классификационной модели для прогноза мутагенности	3	Т	1		1
8	ЛПЗ	Использование KNIME для создания QSAR моделей	3	Т	1		1

Раздел 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов

Тема 1. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов

1	ЛЗ	Компьютерная оценка побочных эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями, ADME, межлекарственного взаимодействия на основе структуры лекарственного вещества.	2	Д	1		
2	ЛПЗ	Компьютерная оценка адсорбции, распределения, метаболизма, выведения и межлекарственного взаимодействия.	3	Т	1		1
3	ЛЗ	Поиск лекарственных мишеней. Базы данных мишеней лекарственных соединений.	2	Д	1		
4	ЛПЗ	Компьютерная оценка токсических эффектов. Компьютерная оценка фармакологических эффектов, взаимодействия с лекарственными мишенями.	3	Т	1		1

5	К	Рубежный контроль по разделам 1-2	3	Р	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.							
1	ЛЗ	Основы молекулярной механики.	2	Д	1		
2	ЛЗ	Структура белка. Моделирование трехмерной структуры белка.	2	Д	1		
3	ЛЗ	Взаимодействие белок-лиганд.	2	Д	1		
4	ЛПЗ	Визуализация 3D структур и изучение свойств белковых молекул при помощи программы PyMol.	3	Т	1		1
5	ЛПЗ	Моделирование трехмерной структуры белка методом гомологического моделирования в программе Swiss-Model	3	Т	1		1
6	ЛПЗ	Введение в AutoDock Vina	3	Т	1		1
7	ЛПЗ	Виртуальный скрининг с использованием 3D структуры мишени в AutoDock	3	Т	1		1
8	К	Рубежный контроль по разделу 3	3	Р	1	1	

Текущий контроль успеваемости обучающегося в семестре осуществляется в формах, предусмотренных тематическим планом настоящей рабочей программы дисциплины.

Формы проведения контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся /виды работы обучающихся

№ п/п	Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся (ФТКУ)	Виды работы обучающихся (ВРО)
1	Контроль присутствия (КП)	Присутствие

2	Опрос комбинированный (ОК)	Выполнение заданий в устной и письменной форме
3	Решение практической (ситуационной) задачи (РЗ)	Решение практической (ситуационной) задачи

4.2. Формы проведения промежуточной аттестации

9 семестр

1) Форма промежуточной аттестации - Зачет

2) Форма организации промежуточной аттестации -Контроль присутствия, Опрос комбинированный

5. Структура рейтинга по дисциплине

5.1. Критерии, показатели проведения текущего контроля успеваемости с использованием балльно-рейтинговой системы.

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.

9 семестр

Виды занятий		Формы текущего контроля успеваемости /виды работы		Кол-во контролей	Макс. кол-во баллов	Соответствие оценок рейтинговым баллам ***				
						ТК	ВТК	Отл.	Хор.	Удовл.
Лабораторно-практическое занятие	ЛПЗ	Решение практической (ситуационной) задачи	РЗ	11	308	В	Т	28	19	10
Коллоквиум	К	Опрос комбинированный	ОК	2	702	В	Р	351	234	117
Сумма баллов за семестр					1010					

5.2. Критерии, показатели и порядок промежуточной аттестации обучающихся с использованием балльно-рейтинговой системы. Порядок перевода рейтинговой оценки обучающегося в традиционную систему оценок

Порядок промежуточной аттестации обучающегося по дисциплине (модулю) в форме зачёта

По итогам расчета рейтинга по дисциплине в 9 семестре, обучающийся может быть аттестован по дисциплине без посещения процедуры зачёта, при условии:

Оценка	Рейтинговый балл
Зачтено	600

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации

9 семестр

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

Раздел 1. Хемоинформатика

1. Основная догма хемоинформатики.
2. Представления молекул.
3. Основные идентификаторы химических соединений.
4. Цели компьютерного представления химических структур.
5. Линейное представление структур молекул.
6. Топологическое представление структур молекул.
7. Формат SMILES, его преимущества и недостатки.
8. MOL формат, его преимущества и недостатки.
9. Формат InChI, его преимущества и недостатки.
10. Формула Маркуша, его преимущества и недостатки.
11. Сходство химических соединений
12. Коэффициент Танимото.
13. Понятие “activity cliff”
14. Свободно доступные базы данных, содержащих информацию о структуре и биологической активности химических и природных соединений.
15. Химические редакторы.
16. Дескрипторы химических соединений.
17. KNIME.
18. OECD принципы валидации QSAR моделей.
19. Методы машинного обучения, используемые для создания QSAR моделей.
20. Алгоритм создания и валидации QSAR моделей.

Раздел 2. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры лигандов

1. Острая и хроническая токсичность
2. Экстраполяция экспериментальных данных полученных на животных на человека
3. Основные эффекты, используемые для оценки экотоксичности
4. Основные эффекты, используемые для оценки токсикологических свойств лекарств у человека

5. Компьютерные программы используемые для оценки экотоксикологических свойств соединений (методы машинного обучения, дескрипторы, особенности)
6. Компьютерные программы используемые для оценки токсикологических свойств соединений (методы машинного обучения, дескрипторы, особенности)
7. Понятие off-target и anti-target мишени. Примеры мишеней, связанных с побочными эффектами.
8. Взаимодействия лекарств. Типы взаимодействия лекарств.
9. Биологическое взаимодействие лекарств.
10. Компьютерные программы PASS, GUSAR и PharmaExpert
11. Компьютерный прогноз метаболизма соединений.
12. Компьютерный прогноз ADME свойств (примеры свойств). Свободно-доступные веб сервисы для прогноза ADME свойств.
13. Свободно-доступные веб сервисами по предсказанию взаимодействия лигандов с мишенями
14. Свободно-доступные сервисы по предсказанию токсичности
15. Базы данных мишеней лекарственных соединений

Раздел 3. Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени

1. Два основных подхода по моделированию структуры и свойств молекул. Преимущества и ограничения.
2. Поля сил: что входит в понятие, основное уравнение, откуда берутся параметры.
3. Конформация молекул, методы расчета конформаций
4. Белки: пептидная связь, карта Рамачандра, основные силы, участвующие в фолдинге и поддержании структуры белка
5. Первичная, вторичная, третичная и четвертичная структура белка. Методы определения структуры белка
6. Основные методы моделирования трехмерной структуры белка. Преимущества и ограничения
7. Что нужно для полной характеристики взаимодействия белка и лиганда

8. Модели взаимодействия белок-лиганд, основные принципы, заложенные в них
9. Какие силы участвуют в взаимодействии белок-лиганд. Их краткая характеристика.
10. Основные методы 3D-моделирования для Ligand-Based Drug Design
11. Какие методы используются при виртуальном скрининге
12. Фильтры для подготовки базы данных для виртуального скрининга
13. Методы генерация поз лигандов при молекулярном докинге.
14. Оценочные функции докинга: типы оценочных функций, что учитывают, что нет. Точность оценочных функций.

Зачетный билет для проведения зачёта

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)

Зачетный билет № _____

для проведения зачета по дисциплине Б.1.О.10 Компьютерное конструирование лекарств
по программе Специалитета
по направлению подготовки (специальности) 33.05.01 Фармация
направленность (профиль) Фармация

Теоретические вопросы:

1. Основная догма хемоинформатики.
2. Экстраполяция экспериментальных данных полученных на животных на человека
3. Два основных подхода по моделированию структуры и свойств молекул.
Преимущества и ограничения.

Практическое задание:

Необходимо в DataWarrior на основе данных из ChEMBL создать SD файл, а потом в KNIME построить workflow для заданной мишени с использованием, которого необходимо объединить данные для дубликатов структур, перевести значения IC50 из нМ в молярные значения вида pIC50, сделать разделение на активные и неактивные соединения по порогу 1000 нМ, разделить выборку на обучающую и тестовую выборки в отношении 80:20 и сохранить выборки в SD файлах с информацией о структурах и pIC50. На основе созданных выборок построить количественную зависимость «структура-активность» и классификационную модель, оценить точность моделей на тестовой выборке (рассчитать R^2 и RMSE – для количественной модели и Accuracy для классификационной модели). Используйте разные дескрипторы или фингерпринты, а также разные методы машинного обучения, чтобы получились приемлемые модели. С использованием полученных моделей необходимо отобрать самое активное вещество из предоставленной в виде SD файла выборки образцов коммерчески доступных химических соединений, которое предсказывается, как количественной моделью, так и качественной моделью. Проведите 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 R^2 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).

Название мишеней:

- 1 Alpha-2A adrenergic receptor
- 2 Adenosine receptor A2a
- 3 B2 bradykinin receptor
- 4 Sodium channel protein type 5 subunit alpha
- 5 Serotonin 2b (5-HT2b) receptor

Заведующий Лагунин Алексей Александрович
Кафедра биоинформатики МБФ

7. Методические указания обучающимся по освоению дисциплины

Для подготовки к занятиям лекционного типа обучающийся должен

1. Иметь доступ к сети "Интернет".
2. Иметь тетрадь для записи конспектов.
3. Ознакомиться с учебным материалом по учебнику, учебным пособиям, а также электронным образовательным ресурсам с темой данной лекции.
4. Записать возможные вопросы, которые следует задать преподавателю по материалу изученной лекции.

Для подготовки к занятиям лабораторно-практического типа обучающийся должен

1. Прослушать лекцию, записанную в личном кабинете студента, и законспектировать ее.
2. Ознакомиться с теоретическим материалом, изложенным в учебниках, методических пособиях и в личном кабинете студента.
3. Выполнить письменные домашние задания для подготовки к занятию.
4. Ознакомиться и оформить лабораторную работу по теме занятия.
5. Ознакомиться с тестовыми занятиями по изучаемой теме в личном кабинете студента, пройти самоконтрольное тестирование.
6. Подготовить конспект к занятию по изучаемой теме.

Для подготовки к коллоквиуму обучающийся должен

Для подготовки к текущему рубежному (модульному) контролю обучающемуся следует изучить учебный материал по темам и (или) разделам дисциплины, включенным в данный рубежный контроль. Ознакомиться с примером билета, ознакомиться с тестовыми заданиями в личном кабинете студента. Проработать задания, которые давались на каждом занятии и выложены в личном кабинете студента.

При подготовке к зачету необходимо

1. Ознакомиться с примером билета, выносимого на промежуточную аттестацию в форме зачета;
2. Ознакомиться с тестовыми заданиями в личном кабинете студента;
3. Проанализировать материал и наметить последовательность его повторения;
4. Определить наиболее простые и сложные темы и (или) разделы дисциплины;
5. Повторить материал по наиболее значимым/сложным темам и (или) разделам дисциплины по конспектам лекций и учебной литературе, а также электронным образовательным ресурсам.

Самостоятельная работа студентов (СРС) включает в себя

Закрепление и углубление полученных знаний, умений и навыков, поиск и приобретение новых знаний, выполнение учебных заданий, подготовку к предстоящим занятиям, текущему контролю успеваемости и промежуточной аттестации.

Выполнение домашних заданий осуществляется в форме:

- работы с учебной, учебно-методической и научной литературой, электронными образовательными ресурсами (например, просмотр видеолекций), конспектами обучающегося: чтение, изучение, анализ, сбор и обобщение информации, её конспектирование; подготовки

ответов на вопросы.

- решения задач, выполнения письменных заданий и упражнений.

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

8.1. Перечень литературы по дисциплине:

№ п /п	Наименование, автор, год и место издания	Используется при изучении разделов	Количество экземпляров в библиотеке	Электронный адрес ресурсов
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 лигандов Компьютерное конструирование лекарств на основе структуры мишени	80	

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

1. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>
2. <http://zinc.docking.org/>
3. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
4. <http://www.drugbank.ca/>
5. <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
6. Молекулярное моделирование [Электронный ресурс] : теория и практика : пер. с англ. / Х.-Д. Хельтье [и др.]. – 3-е изд. (эл.). – Москва: БИНОМ. Лаб. знаний, 2020. – 322 с.

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

1. Автоматизированный информационный комплекс «Цифровая административно-образовательная среда РНИМУ им. Н.И. Пирогова»
2. Система управления обучением
3. KNIME
4. AutoDock Vina
5. DataWarrior

8.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

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 (модуля):

№ п/п	Наименование оборудованных учебных аудиторий	Перечень специализированной мебели, технических средств обучения
1	Аудитория, оборудованная мультимедийными и иными средствами обучения	Компьютер персональный, Компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет», Стулья, Столы, Проектор мультимедийный, Экран для проектора, Возможность подключения к сети «Интернет» и обеспечения доступа в электронную информационно-образовательную среду, Компьютеры для обучающихся
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.

Приложение 1
к рабочей программе
дисциплины (модуля)

Сведения об изменениях в рабочей программе дисциплины (модуля)

для образовательной программы высшего образования – программы бакалавриата/специалитета /магистратуры (оставить нужное) по направлению подготовки (специальности) (оставить нужное) _____ (код и наименование направления подготовки (специальности)) направленность (профиль) « _____ » на _____ учебный год.

Рабочая программа дисциплины с изменениями рассмотрена и одобрена на заседании кафедры _____ (Протокол № _____ от « ____ » _____ 20 ____).

Заведующий _____ кафедрой _____ (подпись)
_____ (Инициалы и фамилия)

Приложение 2
к рабочей программе
дисциплины (модуля)

Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Сокращённое наименование	
Контроль присутствия	Присутствие	КП
Опрос комбинированный	Опрос комбинированный	ОК
Решение практической (ситуационной) задачи	Практическая задача	РЗ

Виды учебных занятий и формы промежуточной аттестации

Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Сокращённое наименование	
Лекционное занятие	Лекция	ЛЗ
Лабораторно-практическое занятие	Лабораторно-практическое	ЛПЗ
Коллоквиум	Коллоквиум	К
Зачет	Зачет	З

Виды контроля успеваемости

Формы проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации	Сокращённое наименование	
Текущий дисциплинирующий контроль	Дисциплинирующий	Д
Текущий тематический контроль	Тематический	Т
Текущий рубежный контроль	Рубежный	Р
Промежуточная аттестация	Промежуточная аттестация	ПА