

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Б1.В.ДВ.02.01
(индекс дисциплины)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Основы молекулярного моделирования биологически активных соединений
(наименование дисциплины)

по направлению подготовки
04.03.01 Химия

направленность (профиль)
Медицинская и фармацевтическая химия

Форма обучения: очная

Год набора: 2026

Общая трудоемкость: 5 ЗЕ

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр	8	Итого
Вид занятий	Зачёт с оценкой	
Лекции		
Лабораторные	96	96
Практические		
Руководство: курсовые работы (проекты) / РГР		
Промежуточная аттестация	0,25	0,25
Контактная работа	96,25	96,25
Самостоятельная работа	83,75	83,75
Контроль		
Итого	180	180

Рабочую программу составил(и):

доцент, Бунев А.С.
профессор, к.б.н., Хоченков Д.А.
доцент, к.м.н., Петров А.В.

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рецензирование рабочей программы дисциплины:



Отсутствует



Рецензент

(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана
направления подготовки

04.03.01 Химия

Срок действия рабочей программы дисциплины до «31» августа 2030 г.

УТВЕРЖДЕНО

На заседании центра медицинской химии

(протокол заседания № 1 от «28» августа 2025 г.).

1. Цель освоения дисциплины

Формирование у студентов фундаментальных представлений о современном молекулярном моделировании в приложении к разработке физиологически активных соединений.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Органическая химия и основы органического синтеза», «Аналитическая химия», «Биохимия клетки 1,2», «Химия гетероциклических соединений 1», «Медицинская химия 1,2», «Большие данные в химии».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: «Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы».

3. Планируемые результаты обучения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
ПК-1 Способен планировать и осуществлять направленный органический синтез биологически активных соединений на основе современных подходов структурно-ориентированного и лиганд-ориентированного молекулярного дизайна под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-1.1 Выбирает и использует основные подходы в структурно-ориентированном и лиганд-ориентированном молекулярном дизайне, достижения в этой области и возможные пути развития направленного синтеза для решения поставленных задач НИР	Знать: основные методологические подходы используемые в структурно-ориентированном, лиганд-ориентированном молекулярном моделировании, включая методы получения комбинаторных библиотек (фокусных, диверсифицированных, библиотек молекулярной сложности и др.)
		Уметь: на основе данных молекулярного моделирования отобрать привилегированные структуры для дальнейшего синтеза и in vitro исследования
		Владеть: базовыми методами в области мишень- и лиганд ориентированного молекулярного моделирования в приложении к отбору и синтезу новых биологически активных соединений
	ПК-1.2 Планирует и проводит отдельные стадии исследования по синтезу заданной структуры биологически активного	Знать: последовательность и стадии исследования при синтезе заданной структуры биологически активного соединения

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
	соединения в рамках структурно-ориентированного и лиганд-ориентированного подхода, при наличии общего плана НИР	<p>Уметь: планировать и осуществлять сложные многостадийные синтетические схемы получения дизайнерских лекарств</p> <p>Владеть: структурно-ориентированным и лиганд-ориентированным подходом для конструирования биологически активного соединения заданной структуры</p>
ПК-4 Способен осуществлять конструирование биологически активных соединений с заданным фармакологическим и токсикологическим профилем на основе современных представлений медицинской химии под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-4.1 Планирует отдельные стадии исследования по молекулярному дизайну с применением современного программного обеспечения, при наличии общего плана НИР	Знать: основные методологические подходы используемые при молекулярном моделировании с применением специализированного программного обеспечения
		Уметь: планировать эксперименты по молекулярному моделированию биологически активных соединений.
		Владеть: приемами конструирования биологически активных соединений с заданным фармакологическим и токсикологическим профилем (специализированным программным обеспечением, теоретическими моделями)
	ПК-4.2 Реализует эксперименты по молекулярному моделированию с применением современных методов молекулярного докинга и QSAR-анализа для решения поставленных задач НИР.	Знать: основные методологические подходы используемые в структурно-ориентированном, лиганд-ориентированном молекулярном моделировании, включая методы высокопроизводительного молекулярного докинга, QSAR-анализ и 3D-QSAR
		Уметь: правильно выбирать (отбирать) биологическую мишень и проводить моделирование высокоаффинного лиганда, включая <i>de novo</i> дизайн

Формируемые и контролируемые компетенции (код и наименование)	Индикаторы достижения компетенций (код и наименование)	Планируемые результаты обучения
		Владеть: основным инструментарием и навыками для осуществления профессиональной деятельности в области молекулярного моделирования

4. Структура и содержание дисциплины

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лаб 1	Анализ комбинаторных библиотек. Подходы к ранжированию и фильтрации	8	4	-	-	
	Лаб 2	Построения молекулярных моделей	8	4	-	-	
	Лаб 3	Субструктурный поиск в коммерческих базах данных НМОС	8	4	-	-	
	Лаб 4	Построение моделей белков	8	4	-	-	
	Лаб 5	PAINS анализ	8	4	25	-	Контрольная работа №1
	Лаб 6	Построение фармакофора на основе данных PCA белок-лиганд. Часть 1	8	4	-	-	
	Лаб 7	Построение фармакофора на основе данных PCA белок-лиганд. Часть 2	8	6	-	-	
	Лаб 8	Молекулярный докинг ингибиторов EGFR	8	6	-	-	

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лаб 9	Молекулярный докинг ингибиторов PI3K	8	6	25	-	Контрольная работа №2
	Лаб 10	Молекулярный докинг ингибиторов сборки тубулина	8	6	-	-	
	Лаб 11	Молекулярный докинг ингибиторов MAPK15	8	6	-	-	Коллоквиум
	Лаб 12	Молекулярный докинг ингибиторов VEGFR	8	6	-	-	
	Лаб 13	QSAR-анализ малой комбинаторной библиотеки. Часть 1	8	6	-	-	
	Лаб 14	QSAR-анализ малой комбинаторной библиотеки. Часть 2	8	6	25	-	Контрольная работа №3
	Лаб 15	QSAR-анализ малой комбинаторной библиотеки. Часть 3	8	6	-	-	
	Лаб 16	3D-QSAR-анализ малой комбинаторной библиотеки	8	6	-	-	
	Лаб 17	ADMET-характеристики	8	6	25	-	Контрольная работа №4

Модуль (раздел)	Вид учебной работы	Наименование тем занятий (учебной работы)	Семестр	Объем, ч.	Баллы	Интерактив, ч.	Формы текущего контроля (наименование оценочного средства)
	Лаб 18	Молекулярный докинг СУР	8	6	-	-	
	Ср	Изучение лекционного материала и оригинальной литературы. Подготовка к экзамену	8	83,75	-	-	
	ПА	Промежуточная аттестация (экзамен)	8	0,25	-	-	Вопросы к зачёту с оценкой № 1-60
Итого:				180			

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины используется технология традиционного обучения – организация учебного процесса в вузе, основанная на лекционно-семинарско-зачетной формах обучения. К формам обучения относятся лекции, практические и лабораторные занятия, а также самостоятельная работа. На лекциях используются наглядные и словесные методы обучения, на практических и лабораторных занятиях – наглядные, словесные и практические методы.

6. Методические указания по освоению дисциплины

Самостоятельная работа – это совокупность всей самостоятельной деятельности студентов, как в учебной аудитории, так и вне ее, в контакте с преподавателем и в его отсутствии.

Самостоятельная работа реализуется:

- непосредственно в процессе аудиторных занятий.
- в контакте с преподавателем вне рамок расписания – консультации по учебным вопросам и при выполнении творческих и индивидуальных заданий.
- в виде внеаудиторной самостоятельной работы.

Самостоятельная работа студентов предполагает более углубленное освоение материала лабораторных занятий, отдельных вопросов материала курса, выносимых на самостоятельное изучение, а также творческих заданий, связанных с образовательной и научной исследовательской деятельностью.

Целевые направления самостоятельной работы студентов:

1. Для овладения и углубления знаний:
 - конспектирование текста;
 - составление тезауруса;
 - ознакомление с нормативными документами;
 - создание презентации.
2. Для закрепления знаний:
 - работа с конспектом лекции;
 - повторная работа с учебным материалом;
 - составление плана ответа;
 - составление различных таблиц.
3. Для систематизации учебного материала:
 - подготовка ответов на контрольные вопросы;
 - подготовка сообщения, доклада, реферата;
 - тестирование;
 - составление инструкции и памятки.
4. Для формирования практических и профессиональных умений.
 - решение задач и упражнений по образцу;
 - решение ситуативных и профессиональных задач;

Средства обучения:

- дидактические средства, которые могут быть источником самостоятельного приобретения знаний (первоисточники, документы, сборники задач и упражнений, журналы и газеты, учебные фильмы, карты, таблицы);

- технические средства, при помощи которых предъявляется учебная информация (компьютеры, аудио - видеотехника);
- средства, которые используют для руководства самостоятельной деятельностью студентов (инструктивно - методические указания, карточки с дифференцированными заданиями для организации индивидуальной и групповой работы, карточки с алгоритмами выполнения заданий).

7. Оценочные средства

7.1. Паспорт оценочных средств

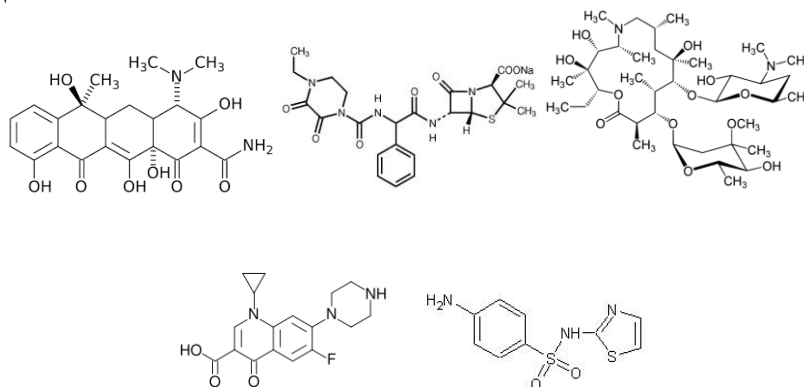
Семестр	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
8	ПК-1; ПК-4	Контрольные работы 1-4 Вопросы к коллоквиуму 1-30 Вопросы к зачёту с оценкой 1-60

7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

7.2.1. Контрольная работа

Типовые примеры заданий

1. Какая существует классификация химиотерапевтических средств? На какие разновидности они делятся по специальным показаниям?
2. На какие группы делятся антибиотики по химической структуре и антимикробному спектру?
3. Что такое бактерицидный и бактериостатический эффект?
4. В чем заключается сущность дисково-диффузионного метода? Для каких целей его применяют?
5. В чем заключается механизм действия бета-лактамовых антибиотиков?
6. Охарактеризуйте фармакокинетические параметры пенициллинов.
7. Чем обусловлено появление различных поколений цефалоспоринов? Чем одно поколение отличается от другого?
8. Каков механизм действия сульфаниламидов?
9. Какой антимикробный спектр сульфаниламидов?
10. Какова фармакокинетика фторхинолонов?
11. Определите класс антибиотика



Критерии оценки:

Максимальное количество баллов за каждую контрольную 25 баллов, всего за семестр 100 баллов. Допуском к зачету является набор студентом более 75 баллов:

- оценка «отлично» (25 баллов) выставляется студенту, если студент выполняет все задания контрольной работы без ошибок;
- оценка «хорошо» (20 баллов) выставляется студенту, если студент допускает ошибку в одном из заданий контрольной работы;
- оценка «удовлетворительно» (15 баллов) выставляется студенту, если студент допускает ошибку в двух и более заданиях, но при этом правильно решает одно задание контрольной работы;
- оценка «неудовлетворительно» (0 баллов) выставляется студенту, если студент не выполняет ни одного задания контрольной работы, либо же в ответе на каждое задание контрольной работы допущена ошибка.

7.2.2. Вопросы к коллоквиуму

№ п/п	Вопросы к коллоквиуму
1	Определение макромолекулы и лиганда.
2	Типы лекарственных препаратов: агонисты, антагонисты, обратные агонисты.
3	Основные требования к лекарственному препарату.
4	«Хитовые» молекулы и «лидерные» серии.
5	Высокопроизводительный скрининг.
6	Основные проблемы поиска новых лекарственных средств и необходимость использования вычислительных методов.
7	Базы данных химических соединений.
8	Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций)
9	Основы двумерного субструктурного поиска.
10	Преимущества трехмерных баз данных перед двумерными.
11	Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомacroмолекул.
12	Определение трехмерных фармакофоров и биоизостерных групп.
13	Картография фармакофора.
14	Проблемы расчета трехмерных фармакофоров.
15	Включение дополнительных геометрических особенностей в трехмерный фармакофор
16	Источники данных для трехмерных баз данных
17	Фармакофрные ключи
18	Сущность молекулярного докинга.
19	Основные проблемы и недостатки молекулярного докинга.
20	Функции выигрыша в молекулярном докинге.
21	Понятия о скоринге в молекулярном докинге.
22	Используемые алгоритмы оптимизации в молекулярном докинге.
23	Программы для поиска в трехмерных базах данных. Принципы их работы.
24	Молекулярное подобие и поиск подобия.
25	Типы молекулярных дескрипторов.
26	Коэффициенты распределения: физический смысл и методы расчеты.
27	Программы для расчета молекулярных дескрипторов. Принципы их работы.
28	Молярная рефракция: формулы для расчета, используемые программы.

29	Топологические индексы и их разновидности.
30	Фармакофорные ключи как молекулярные дескрипторы.

Критерии оценки:

Оценка «отлично» соответствует 0 баллов, и является допуском к зачету, если даны правильные ответы на поставленные вопросы.

Оценка «хорошо» соответствует (-10) баллов, если в ответах содержатся небольшие недочёты, и является допуском к зачету.

Оценка «удовлетворительно» соответствует (-20) баллов, если в некоторых ответах содержатся существенные ошибки, и является допуском к зачету.

Оценка «неудовлетворительно» соответствует (-40) баллов, если студент в целом не готов к коллоквиуму, но знаком с некоторыми терминами и определениями. Студент к зачету не допускается.

7.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

К зачету допускаются студенты, набравшие в общей сложности 75 и более баллов.

7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Семестр 8

№ п/п	Вопросы к зачёту с оценкой
1	Определение макромолекулы и лиганда.
2	Типы лекарственных препаратов: агонисты, антагонисты, обратные агонисты.
3	Основные требования к лекарственному препарату.
4	«Хитовые» молекулы и «лидерные» серии.
5	Высокопроизводительный скрининг.
6	Основные проблемы поиска новых лекарственных средств и необходимость использования вычислительных методов.
7	Базы данных химических соединений.
8	Способы двумерного представления структуры молекул (молекулярные графы, MDL MOL формат, различные системы линейных нотаций)
9	Основы двумерного субструктурного поиска.
10	Преимущества трехмерных баз данных перед двумерными.
11	Источники информации о пространственной структуре лигандов и биомacroмолекул.
12	Определение трехмерных фармакофоров и биоизостерных групп.
13	Картография фармакофора.
14	Проблемы расчета трехмерных фармакофоров.
15	Включение дополнительных геометрических особенностей в трехмерный фармакофор
16	Источники данных для трехмерных баз данных
17	Фармакофрные ключи
18	Сущность молекулярного докинга.
19	Основные проблемы и недостатки молекулярного докинга.
20	Функции выигрыша в молекулярном докинге.
21	Понятия о скоринге в молекулярном докинге.

22	Используемые алгоритмы оптимизации в молекулярном докинге.
23	Программы для поиска в трехмерных базах данных. Принципы их работы.
24	Молекулярное подобие и поиск подобия.
25	Типы молекулярных дескрипторов.
26	Коэффициенты распределения: физический смысл и методы расчеты.
27	Программы для расчета молекулярных дескрипторов. Принципы их работы.
28	Молярная рефракция: формулы для расчета, используемые программы.
29	Топологические индексы и их разновидности.
30	Фармакофорные ключи как молекулярные дескрипторы.
31	Расположение благоприятных позиций молекулярных фрагментов в пределах участка связывания.
32	Соединение молекулярных фрагментов в участке связывания.
33	Методы структурно-ориентированного молекулярного дизайна
34	Методы структурно-ориентированного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы ВИЧ-1
35	Методы структурно-ориентированного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы EGFR
36	Методы структурно-ориентированного дизайна на примере проектирования ингибиторов протеазы PI3K
37	Методы структурно-ориентированного дизайна на примере проектирования ингибиторов сборки тубулина
38	Отбор соединений для QSAR-анализа
39	Получение QSAR-уравнений
40	Перекрестная проверка стабильности в QSAR-анализе
41	Введение в моделирование малых молекул. Данные рентгено-структурного анализа, основные преимущества метода и ограничения. Базы кристаллографических данных. Использование библиотек фрагментов. Преобразование двухмерных координат в трехмерные. Основные форматы файлов для хранения данных о химической структуре. Линейная нотация SMILES.
42	Методы молекулярной механики. Основные отличия молекулярной механики от квантовой, приближение Борна-Оппенгеймера. Использование силовых полей как математических моделей. Оценка вклада связанных атомов: деформация связи, валентных и торсионных углов. Оценка вклада несвязанных атомов: энергия электростатических и ван-дер-Ваальсовых взаимодействий. Аддитивные и поляризуемые силовые поля. Гибридные методы квантовой и молекулярной механики (QM/MM).
43	Учет энергии сольватации. Моделирование растворителя в явном виде. Моделирование растворителя как статистического континуума.
44	Методы минимизации энергии. Поверхность потенциальной энергии конформационного пространства молекулы. Метод Ньютона-Рафсона. Метод градиентного спуска. Метод сопряженных градиентов
45	Конформационный поиск и анализ. Идеология конформационного поиска. Методы систематического поиска. Метод стохастического поиска. Генетические алгоритмы конформационного поиска. Конформационный поиск методом молекулярной динамики.
46	Поля молекулярных взаимодействий. Молекулярный электростатический потенциал. Генерация полей взаимодействий. Использование зондов для генерации полей.
47	QSAR моделирование. 1D, 2D QSAR, корреляционные уравнения и линейная регрессия. Требования к данным, используемым в 3D QSAR моделировании. Метод CoMFA. Метод CoMIF. Метод CoMISA.

48	Фармакофорный поиск и анализ. Понятие о фармакофоре. Фармакофорная гипотеза. 2D-отпечатки пальцев. 3D-фармакофоры. Фармакофорный скрининг.
49	Структура белков. Понятие о структурной организации белков. Первичная, вторичная и третичная структура. Фолдинг белков. Парадокс Левинтала. Белок-белковые комплексы.
50	Введение в молекулярное моделирование белков. Данные РСА для моделирования белков: принципы, достоинства и ограничения. Методы ЯМР спектроскопии белков. Криоэлектронная микроскопия. Базы данных.
51	Генерация структуры белков. Моделирование по гомологии. Моделирование последовательностей. Моделирование консервативных и переменных областей. Моделирование боковых цепей.
52	Подготовка и оптимизация структуры белка. Оптимизация геометрии белков. Карты Рамачандрана. Использование силовых полей. Методы молекулярной динамики для оптимизации геометрии белков.
53	Виртуальный скрининг и докинг. Введение в молекулярный докинг: понятия о гибкости белка и лиганда. Взаимодействия лиганда с белком: водородные связи, солевые мостики, стэкинг-взаимодействия, гидрофобные взаимодействия. Индуцированный докинг.
54	Оценочные функции. Понятие об уравнении оценочной функции. Эмпирические функции. Функции, основанные на знаниях и силовых полях.
55	Подготовка структур к докингу. Проблемы, возникающие при использовании данных РСА. Понятие о грид-боксе. Валидация модели: нативный докинг и параметры валидации. Подготовка лигандов к докингу.
56	Алгоритмы докинга. Постепенное конструирование. Генетические алгоритмы стыковки. Метод табу-поиска. Моделирование отжига.
57	Ковалентный докинг. Понятия об обратимом и необратимом связывании. Нуклеофильно-реактивные аминокислотные остатки. Алгоритмы ковалентного докинга.
58	Белок-белковый докинг. Понятие об интерфейсе белок-белковых взаимодействий. Принципы и применение. Ограничения белок-белкового докинга.
59	Дизайн и создание виртуальных комбинаторных библиотек. Основные принципы создания библиотек. Кластеризация: индексы подобия, понятие о структурном разнообразии. Фильтрация библиотек, исключение токсических групп. PAINS. Аннотирование библиотек. Методы виртуального скрининга, основанные на лигандах.
60	Интерпретация результатов виртуального скрининга. Понятие о вероятностном характере распределения результатов. Ложноположительные и ложноотрицательные результаты. ROC-кривая и показатель AUC. Коэффициент обогащения результатов виртуального скрининга. Success-rate: эффективность виртуального скрининга.

7.3.2. Критерии и нормы оценки

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
8	Зачёт с оценкой	«отлично»	Полные и четкие ответы на вопросы экзаменационного билета; Правильные ответы на дополнительные вопросы по лекционному курсу

Семестр	Форма проведения промежуточной аттестации	Критерии и нормы оценки	
		«хорошо»	Достаточно полные ответы на вопросы теоретического характера экзаменационного билета, однако при детализации некоторых ответов испытывает затруднения; Нечетко отвечает на дополнительные вопросы, проявляя при этом неглубокие знания
		«удовлетворительно»	Показывает неполные или неглубокие знания при ответе на теоретические вопросы, При ответе на дополнительные вопросы испытывает серьезные затруднения
		«неудовлетворительно»	Не отвечает на вопросы теоретического характера или отвечает неправильно, неполно;

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

8.1. Обязательная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Хёльте Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г.	Молекулярное моделирование: теория и практика / Х. -Д. Хёльте, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс ; перевод А. А. Олиференко [и др.]. – 5-е изд. – Москва : Лаборатория знаний, 2020. – 320 с. – ISBN 78-5-00101-724-0. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/40388.html	Учебное пособие	2020	ЭБС «IPRbooks»

8.2. Дополнительная литература

№ п/п	Авторы, составители	Заглавие (заголовок)	Тип (учебник, учебное пособие, учебно- методическое пособие, практикум, др.)	Год издания	Количество в научной библиотеке / Наименование ЭБС
1	Степанов В.М. ред. Спирин А.С.	Степанов, В. М. Молекулярная биология. Структура и функция белков : учебник / В. М. Степанов ; под редакцией А. С. Спирин. – Москва : Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2005. – 336 с. – ISBN 5-211-04971-3. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: http://www.iprbookshop.ru/13144.html	Учебник	2005	ЭБС «IPRbooks»

8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

- Бутлеровские сообщения [Электронный ресурс] : многопредмет. науч. журн. / ООО «Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие». – Электрон. журнал. – Казань : ООО «Инновационно-издательский дом «Бутлеровское наследие», 1999- . Режим доступа к журн.: <http://butlerov.com/stat/reports/view.asp?lang=ru>
- Химия в интересах устойчивого развития [Электронный ресурс] : междунар. науч. журн. / Сибирское отделение РАН. – Электрон. журнал. – Новосибирск : Издательство СО РАН, 1999- . Режим доступа к журн. <http://www.sibran.ru/journals/Hviur/>
- WebofScience [Электронный ресурс]: мультидисциплинарная реферативная база данных. – Philadelphia: ClarivateAnalytics, 2016 – Режим доступа: apps.webofknowledge.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Scopus [Электронный ресурс]: реферативная база данных. – Netherlands: Elsevier, 2004 – Режим доступа: scopus.com. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Elibrary [Электронный ресурс]: научная электронная библиотека. – Москва: НЭБ, 2000. – Режим доступа: elibrary.ru. – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- SpringerLink [Электронный ресурс]: [база данных]. – Switzerland: SpringerNature, 1842. – Режим доступа: link.springer.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ScienceDirect [Электронный ресурс]: коллекция электронных книг издательства Elsevier. – Netherlands: Elsevier, 2018. – Режим доступа: sciencedirect.com. – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ЭБС «Лань» (права принадлежат ООО «ЭБС ЛАНЬ»), договор № 410 от 19.04.2021 г. с 07.05.2021. по 06.05.2022 (по адресу <http://www.e.lanbook.com>) включает в себя полнотекстовые электронные версии всех книг, вышедших в издательстве, а также коллекции полнотекстовых файлов других издательств. В базе представлены не только учебные издания, но и научная литература, а также словари.
- ЭБС «IPRbooks» (права принадлежат ООО Компания «Ай Пи Ар Медиа»), договор № 620 от 15.06.2021 г. с 01.08.2021 по 01.08.2022 (по адресу <http://www.iprbookshop.ru>)- содержит учебники и учебные пособия, монографии, производственно-практические, справочные издания, а также деловую литературу для практикующих специалистов. В ЭБС включены издания за последние 5 лет по гуманитарным, социальным и экономическим наукам, по остальным отраслям знания - за последние 10 лет.

8.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	Windows: WinPro 10 RUS Upgrd OLP NL Acdmc	договор № 757 от 04.07.2018, срок действия – бессрочно; контракт № 1653 от 14.12.2018, срок действия – бессрочно
2	Office Standard: Office Stdandard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition	договор № 690 от 19.05.2015, срок действия – бессрочно.

8.5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)	Перечень основного оборудования
1	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А-215	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
2	Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации. А-306	Столы ученические двухместные (моноблоки), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая), таблица Менделеева.
3	НИЛ «Функциональные гетероциклические соединения» Лаборатория органической химии. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. А-203	Доска меловая, стол письменный, шкаф лабораторный для посуды, стеллаж металлический, мешалка магнитная ММ-5, колбонагреватель ЕС-4110, электроплита, плитки электрические, сушильный шкаф ПЭ-4610, стол-мойка двойная 1200/600/850, поляриметр круговой СМ-3, рефрактометр ИРФ-454 Б-2м, рефрактометр RL3, штативы лабораторные ШЛБ, шкафы вытяжные, стол островной, стол приборный, мойка 60*80 SAFA левая, комплект моделей кристаллических решеток, компрессор, штатив для пипеток, табуреты лабораторные, химическая посуда
4	Помещение для самостоятельной работы студентов. Г-401	Столы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет.