

Аннотация к рабочей программе дисциплины «Основы компьютерного моделирования»

Рабочая программа учебной дисциплины «Основы компьютерного моделирования» разработана для студентов 5 курса специализации 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация «Медицинская химия» в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению. Входит в вариативную часть учебного плана, дисциплины по выбору: Б1.В.02.03. Трудоемкость дисциплины 5 зачетных единиц, 180 часов. Дисциплина включает 26 часов лекций, 40 часов практических занятий и 114 часов самостоятельной работы (из них 36 часов отведены на экзамен), завершается экзаменом. Реализуется в 9 семестре.

Курсу «Основы компьютерного моделирования» предшествуют необходимые для его понимания курсы: «Органическая химия», «Биоорганическая химия», «Физическая химия», «Биология с основами экологии». Дисциплина «Основы компьютерного моделирования» способствует формированию у студентов основных структурных представлений в области биоорганической химии и биотехнологии и получению более глубоких знаний о строении биомолекул и их комплексов на атомном уровне. Приобретение навыков в области построения и анализа пространственных структур биомолекул и их комплексов с помощью компьютерных и информационных технологий. Для успешного изучения курса необходимо хорошее знание органической химии и классификации биомолекул. Необходимо иметь базовые знания в области биоорганической химии, знать принципы строения белков, пептидов, нуклеиновых кислот, углеводов и низкомолекулярных метаболитов. Необходимы общие представления о работе с компьютерами и программами. Необходимо знать основы структурного устройства белков и пептидов, нуклеиновых кислот, углеводов, основных групп липидов и низкомолекулярных метаболитов, включая первичную, вторичную и третичную структуры белков и биополимеров. Дисциплина «Основы компьютерного моделирования» способствует формированию у студентов основных структурных представлений в области биоорганической химии и биотехнологии и получению более глубоких знаний о строении биомолекул и их комплексов на атомном уровне. Приобретение навыков в области построения и анализа пространственных структур биомолекул и их комплексов с помощью компьютерных и информационных технологий.

Цель освоения дисциплины «Основы компьютерного моделирования» состоит в обучении студентов компьютерным технологиям для изучения и

анализа структуры биомолекул и моделирования их комплексов; в освоении современных компьютерных методов для решения задач биоорганической и медицинской химии, биотехнологии и дизайна новых лекарственных препаратов.

Задачи:

- освоение программ, методов моделирования и анализа пространственных структур всех классов биомолекул;
- обучение работе с современными базами данных по структуре биомолекул;
- освоение программ по молекулярному докингу и молекулярной динамике с использованием высокопроизводительных вычислительных систем и параллельных вычислений.

Для успешного изучения дисциплины «Основы компьютерного моделирования» у обучающихся должны быть сформированы следующие знания и умения, соответствующие предварительным компетенциям:

- Способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1).
- Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1).
- Владение навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2).
- Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-8).
- Способность проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1),
- Владение системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания (ПК-3).

В результате изучения данной дисциплины у обучающихся формируются следующие компетенции:

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
Способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-	Знает	принципы структурной организации и моделирования структуры биомолекул.
	Умеет	применять полученные знания при исследовании биологических молекул; решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и

коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-4)		вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности.
	Владеет	базовыми навыками для моделирования и интерпретации полученных результатов; методами решения задач профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности.
Владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ПК-6)	Знает	методологию проведения структурно-функциональных исследований биологически активных соединений различных классов с использованием компьютерных технологий.
	Умеет	определять цель и задачи исследования, планировать и проводить эксперименты с использованием компьютерных технологий.
	Владеет	навыками поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований; навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов; навыками использования современных программ и пакетов программ по компьютерному моделированию биомолекул.

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Основы компьютерного моделирования» применяются следующие методы активного/интерактивного обучения: лекции-беседы, проблемные лекции.