

Специальность / Speciality: 7-07-0531-01 Фундаментальная химия / 7-07-0531-01 Fundamental Chemistry

Учебная дисциплина, модуль / Academic discipline, module: Хемоинформатика, Компьютерная химия / Chemoinformatics, Computer Chemistry

Краткое содержание учебной дисциплины, модуля / Brief summary	<i>Вносится описание на русском языке</i>	<i>Вносится описание на английском языке</i>
Формируемые компетенции / The formed competences	Решать профессиональные, научно-исследовательские и инновационные задачи на основе применения информационно-коммуникационных технологий Применять методы химической информатики, молекулярной динамики, компьютерного и математического моделирования для обоснованного описания структуры и свойств химических систем и их поведения в химических процессах	To solve professional, scientific research and innovative problems based on the use of information and communication technologies To apply methods of chemical informatics, molecular dynamics, computer and mathematical modeling to reasonably description of the structure and properties of chemical systems and their behavior in chemical processes
Результаты обучения (знать, уметь, владеть) / Learning outcomes (know, can, be able)	В результате изучения учебной дисциплины студент должен знать: – основные понятия и концепции хемоинформатики; – современные представления о молекулярных дескрипторах уметь: – использовать основные методы прогнозирования биологической активности различных соединений; – проводить квантовохимические расчеты молекулярных дескрипторов;	As a result of studying of the academic discipline, the student must know: - basic concepts and concepts of chemoinformatics; - modern ideas about molecular descriptors be able to: - use basic methods for predicting the biological activity of various compounds; - conduct quantum chemical calculations of molecular descriptors; have skills in:

	владеть: – методологией оценки биологической и фармакологической активности веществ; – основными принципами и методами расчета биологической и фармакологической активности веществ	- methodology for assessing the biological and pharmacological activity of substances; - basic principles and methods for calculating the biological and pharmacological activity of substances
Семестр изучения учебной дисциплины, модуля / Semester of study	9	9
Пререквизиты / Prerequisites	Неорганическая химия, Квантовая химия	Inorganic Chemistry, Quantum Chemistry
Трудоемкость в зачетных единицах (кредитах) / Credit units	3	3
Количество аудиторных часов и часов самостоятельной работы / Academic hour of students' class work, hours of self-directed learning	44 / 50	44 / 50
Требования и формы текущей и промежуточной аттестации / Requirements and forms of current and interim certification	Зачет (устная форма)	End-of-term exam (oral form)