

ХЕМОИНФОРМАТИКА СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ

Богдан О. В., Тарасевич Д. В. (*Одесская государственная академия строительства и архитектуры, г. Одесса, Украина*)

Современные технологии дают возможность создавать совершенно новые с заданными параметрами строительные материалы, позволяющие улучшить качество, скорость и снизить стоимость строительства. Но, как мы понимаем, для этого нужны высококвалифицированные инженеры-исследователи. При подготовке таких инженеров-исследователей важное место занимает разработка и преподавание современных дисциплин. Одной из них является и «Хемоинформатика сложных молекул», которая разрабатывается для студентов, обучающихся по направлению «Инженерное материаловедение». Хемоинформатика находится на стыке информатики, математики, химии, биологии, физики. Предметом изучения данной дисциплины являются математические методы исследования химических явлений. Основная цель преподавания «Хемоинформатики сложных молекул» - подготовка к научно-исследовательской деятельности, связанной с принятием эффективных решений на базе современных информационных технологий. По окончании изучения данного курса студенты должны уметь анализировать, организовывать, управлять и использовать химическую информацию, а также применять методы информатики для решения конкретных химических проблем. В условиях производственной деятельности они должны уметь использовать химическую информацию для прогнозирования физических, химических и биологических свойств соединений и материалов. Данный курс состоит из трех модулей: вводного и двух основных, посвященным теоретическим основам данной дисциплины. Первый модуль «Основные сведения и положения хемоинформатики» включает в себя следующие темы: «Определение хемоинформатики», «Связь хемоинформатики с другими науками», «Внутреннее и внешнее представление химической информацией». Второй модуль «Создание и управление базами данных по химии» состоит из тем: «Особенности управления базами данных по химии», «Software для работы с базами данных химических структур (сохранение, поиск)», «Публичные базы данных, содержащие химическую информацию». И третий модуль «Основные принципы работы с химической информацией» состоит из «Моделирования свойств химических соединений и материалов», «Виртуальный скрининг», «Компьютерный синтез». Применение данного курса позволит повысить качество подготовки студентов по направлению «Инженерное материаловедение».