

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации**

**Аннотация рабочей программы дисциплины**

**Б1.В.ДВ.05.02 Методы физико-математического моделирования биохимических реакций и транспорта молекул**

<b>Направление подготовки:</b>	19.03.01 Биотехнология
<b>Профиль подготовки:</b>	Производство биофармацевтических препаратов
<b>Форма обучения:</b>	очная

**Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

*Компетенции, индикаторы и результаты обучения*

УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач

УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

*Знать:*

УК-1.5/Зн4 Знать основные принципы и закономерности цифрового представления информации для решения поставленных задач.

УК-1.5/Зн8 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки

*Уметь:*

УК-1.5/Ум5 Уметь анализировать задачу, выделяя ее базовые составляющие, определять, интерпретировать и ранжировать информацию, требуемую для решения поставленной задачи.

*Владеть:*

УК-1.5/Нв1 Владеет навыками и методами постановки задач в математической форме, способами оптимизации и выбора оптимального метода решения, методами проведения оценки полученных результатов.

ПК-П4 Способен проводить работы по фармацевтической разработке лекарственных средств

ПК-П4.1 Проводит исследования, испытания и экспериментальные работы по фармацевтической разработке в соответствии с утвержденными планами

*Знать:*

ПК-П4.1/Зн14 Знает основные направления в фармацевтической разработке лекарственных субстанций

*Уметь:*

ПК-П4.1/Ум10 Умеет проводить исследования, испытания и экспериментальные работы по фармацевтической разработке лекарственных субстанций в соответствии с утвержденным планом

### **Место дисциплины в структуре ОП**

Дисциплина (модуль) Б1.В.ДВ.05.02 «Методы физико-математического моделирования биохимических реакций и транспорта молекул» относится к формируемой участниками образовательных отношений части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 7.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

- Б1.В.ДВ.02.01 3-D графика в системе "КОМПАС-ГРАФИКА";
- Б1.В.ДВ.04.02 Биотрансформация лекарственных веществ;
- Б1.В.ДВ.03.01 Биохимические основы иммунитета;
- Б1.О.08 Инженерная графика;
- Б1.О.03 Информационные технологии в профессиональной деятельности;
- Б1.О.28 Оборудование и основы проектирования биотехнологических производств;
- Б1.О.13 Органическая химия;
- Б1.О.18 Основы биохимии и молекулярной биологии;
- Б1.В.ДВ.03.02 Основы генетической инженерии;
- Б1.В.08 Основы клеточной инженерии;
- ФТД.В.02 Основы начертательной геометрии;
- Б1.О.04 Прикладная математика;
- Б1.В.10 Технология выделения и очистки биологически активных веществ;
- Б1.О.12 Философия;
- Б1.В.ДВ.04.01 Химия биологически активных веществ;
- Б1.В.ДВ.02.02 Численные методы;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

- Б1.В.ДВ.08.02 Вирусы в биотехнологии и медицине;
- Б1.В.ДВ.07.01 Инженерная энзимология;
- Б1.В.ДВ.05.01 Моделирование биотехнологических процессов;
- Б1.В.ДВ.08.03 Наноматериалы в биотехнологии;
- Б1.О.28 Оборудование и основы проектирования биотехнологических производств;
- Б1.В.18 Организация производства по GMP;
- Б1.В.ДВ.08.01 Основы микологии;
- Б1.В.ДВ.07.02 Основы производства лекарственных средств из плазмы крови;
- Б3.01(Д) Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы;
- Б1.В.13 Право интеллектуальной собственности в производстве лекарственных средств;
- Б1.В.ДВ.06.01 Применение капиллярного электрофореза и хроматографических методов анализа в биотехнологии;
- Б2.В.01(П) производственная практика (преддипломная практика);
- Б1.О.29 Статистические методы обработки данных с использованием программного обеспечения;
- Б1.В.10 Технология выделения и очистки биологически активных веществ;
- Б1.В.ДВ.06.02 Цифровые устройства измерения, контроля и управления;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

## **2. Содержание разделов, тем дисциплин**

### ***Раздел 1. Введение. Вычислительный эксперимент и его роль в моделировании химических реакций и молекулярного транспорта.***

#### *Тема 1.1. Вычислительный эксперимент и его роль в дизайне молекул и соединений.*

Основы квантовой механики. Матричная механика Гейзенберга. Уравнение Шредингера. Операторы импульса, момента импульса, энергии. Матричное представление операторов. Статистический смысл волновой функции. Принцип неопределенности Гейзенберга. Свободное движение частицы. Волны Де Бройля. Представление Дирака.

### ***Раздел 2. Физико-математические основы современных методов моделирования химических реакций***

#### *Тема 2.1. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Основы понятия об электронной орбитали.*

Уравнение Шредингера и его решение для атома водорода. Атом водорода (разделение переменных). Радиальная часть (полиномы Лагерра). Сферическая часть (шаровые функции, полиномы Лежандра). Квантовые числа. Форма электронных облаков. Спин электрона. Операторы спина. Одноэлектронные спиновые функции. Понятия об электронной орбитали. Спин электрона и уравнение Дирака. Два электрона со спинами. Принцип Паули. Многоэлектронная волновая функция

#### *Тема 2.2. Химические связи. Метод молекулярных орбиталей*

Классификация химических связей и их особенности. Многоэлектронная волновая функция и методы построения молекулярных орбиталей.

### ***Раздел 3. Обзор современных квантово-химических методов***

#### *Тема 3.1. Теория функционала плотности*

Понятие электронной плотности. Подходы, предшествующие современной теории функционала плотности: методы Томаса-Ферми и Томаса-Ферми-Дирака, метод Слейтера (X-alpha), расчет обменной энергии однородного электронного газа, вывод уравнений. Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП, DFT). Вспомогательная система невзаимодействующих электронов и вывод уравнений Кона-Шэма. Приближение локальной плотности (LDA). Обменные и корреляционные функционалы. Локальные и градиентно-скорректированные (GGA) функционалы плотности. Иерархия современных методов DFT. Применение DFT для расчетов свойств возбужденных состояний: методы TD-DFT. Внутренние недостатки современных методов (самовзаимодействие электронов, учет дисперсионных взаимодействий) и пути их устранения.

### ***Раздел 5. Транспорт веществ через биологические мембраны. Пассивный и активный транспорт.***

### Тема 5.1. Общие вопросы транспорта химических веществ через мембраны

1. Пассивный транспорт и облегченная диффузия. Электрофорез. Электродиффузия. Изменение свободной энергии системы. Уравнение Фика. Осмос.
2. Активный транспорт

### Раздел 6. Перенос массы. Уравнение диффузии и его решение

#### Тема 6.1. Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия

Уравнение диффузии и его решение. Начальные и граничные условия. Решение уравнения диффузии в простейших случаях

### Раздел 7. Поток ионов через мембрану.

#### Решение уравнения Нернста-Планка в приближении Гольдмана

#### Тема 7.1. Уравнение Нернста-Планка (электродиффузное уравнение)

Зависимость плотности диффузного потока ионов от концентрации ионов и от градиента потенциала. Вывод уравнения Нернста-Планка. Предельный переход к уравнению Фика. Решение уравнения Нернста-Планка в простейших случаях. Равновесие Доннана. Доннановская разность потенциалов.

**Объем дисциплины и виды учебной работы**

Период обучения	Общая трудоемкость (часы)	Общая трудоемкость (ЗЕТ)	Контактная работа (часы, всего)	Консультации в период теоретического обучения (часы)	Контактные часы на аттестацию в период обучения (часы)	Лекции (часы)	Практические занятия (часы)	Самостоятельная работа студента (часы)	Промежуточная аттестация (часы)
Седьмой семестр	72	2	44	12	2	14	16	28	Зачет
Всего	72	2	44	12	2	14	16	28	

### Разработчик(и)

Научно-образовательный центр биофизических исследований в сфере фармацевтики, доктор физико-математических наук, профессор Циовкин Ю. Ю.