

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 23.06.2022 11:52:19
Уникальный программный ключ:
ca953a0120d891083f939673078e921919118a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»
Факультет физико-математических и естественных наук**

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МССН для направления подготовки:

04.03.01 ХИМИЯ

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

ХИМИЯ

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2022 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Компьютерные технологии в химии» является изучения и внедрения новых компьютерных технологий в химии, развитие способностей к самостоятельной работе, необходимой для проведения современных исследований, подготовка студента к решению профессиональных задач с помощью компьютерной техники, формирование научного мировоззрения и расширения кругозора студента в области информатики и компьютерных технологий.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Компьютерные технологии в химии» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):
УК-12; ОПК-1; ОПК-3; ОПК-5; ОПК-7; ПК-2

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
УК-12	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	УК-12.1. Осуществляет поиск нужных источников информации и данных, воспринимает, анализирует, запоминает и передает информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач;
		УК-12.2. Проводит оценку информации, ее достоверность, строит логические умозаключения на основании поступающих информации и данных.
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов, свойств веществ и материалов
		ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности;
		ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.
ОПК-5	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-5.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля;
		ОПК-5.2. Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности.
ОПК-7	Способен использовать цифровые технологии и методы в профессиональной деятельности в области химии для: изучения и моделирования объектов профессиональной деятельности, анализа данных, представления информации и пр.	ОПК-7.1. Применяет цифровые технологии для поиска, обработки и анализа научной информации в области химии;
		ОПК-7.2. Использует цифровые технологии для постановки исследовательских задач;
		ОПК-7.3. Анализирует экспериментальные данные и применяет вычислительные методы для решения поставленных задач;
		ОПК-7.4. Использует цифровые платформы для научных исследований.
ПК-2	Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1. Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных);
		ПК-2.1. Собирает, обрабатывает, анализирует и обобщает (под руководством специалиста более высокой квалификации) результаты поиска информации по заданной тематике в выбранной области исследований.

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Компьютерные технологии в химии» относится к вариативной компоненте блока Б1 ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Компьютерные технологии в химии».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики	Последующие дисциплины/модули, практики
УК-12	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	Информатика	Учебная практика Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Курсовая работа "Неорганическая химия" Курсовая работа "Аналитическая химия" Курсовая работа "Органическая химия"	Химическая технология Курсовая работа "Физическая химия" Строение вещества Основы квантовой химии Коллоидная химия Высокомолекулярные соединения Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа Хроматография Основы электронной и колебательной спектроскопии Основы ЯМР

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики	Последующие дисциплины/модули, практики
			Основы масс-спектрометрии Химические основы биологических процессов Избранные главы химии Экспериментальные методы исследования в химии Учебная практика Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Информатика	Основы квантовой химии Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа Хроматография Основы электронной и колебательной спектроскопии Основы ЯМР Основы масс-спектрометрии Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ОПК-5	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	Информатика	Оформление, подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы
ОПК-7	Способен использовать цифровые технологии и методы в профессиональной деятельности в области химии для: изучения и моделирования объектов профессиональной деятельности, анализа данных, представления информации и пр.	Информатика Курсовая работа "Неорганическая химия" Курсовая работа "Аналитическая химия" Курсовая работа "Органическая химия"	Курсовая работа "Физическая химия" Учебная практика Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ПК-2	Способен оказывать информационную поддержку	Курсовая работа "Неорганическая химия"	Курсовая работа "Физическая химия"

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики	Последующие дисциплины/модули, практики
	специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	Курсовая работа "Аналитическая химия" Курсовая работа "Органическая химия"	Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Компьютерные технологии в химии» составляет 3 зачетных единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ОЧНОЙ** формы обучения

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)			
		5			
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	36	36			
в том числе:					
Лекции (ЛК)					
Лабораторные работы (ЛР)	36	36			
Практические/семинарские занятия (СЗ)					
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	54	54			
<i>Контроль (зачет с оценкой), ак.ч.</i>	18	18			
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	108	108		
	зач.ед.	3	3		

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Вид учебной работы*
Раздел 1. Теоретические основы компьютерных технологий в химии.	Тема 1.1. Компьютерные технологии. Обзор программных средств, применяемых в химии. Обзор исследовательских задач, решаемых с помощью персональных компьютеров и основных пакетов программного обеспечения для их решения.	ЛР
Раздел 2. Табличные процессоры	Тема 2.1. Программа MS Excel. Форматирование содержимого ячеек. Управление листами книги. Построение диаграмм. Итоговые вычисления. Использование надстроек.	ЛР
	Тема 2.2. Приложение Access пакета MS Office: создание и работа с базами данных	ЛР

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Вид учебной работы*
	Тема 2.3. Пакет Origin анализ и визуализация экспериментальных данных.	ЛР
	Тема 2.4. Управление пакетами и автоматизация операций с помощью VBA	ЛР
Раздел 3. Компьютерные презентации	Тема 3.1. Основы работы с приложением Microsoft Power Point. Приемы и методы размещения графических элементов на слайдах презентаций. Оформление презентации. Подготовка и демонстрация презентации.	ЛР
	Тема 3.2. Обзор приложений для создания презентаций	ЛР
Раздел 4. Информационные системы и базы данных	Тема 4.1. Поиск научно-технической информации в сети Интернет.	ЛР
	Тема 4.2. Системы управления библиографическими базами данных Reference Manager, EndNote, Mendeley и др. Создание и использование персональной коллекции библиографических ссылок	ЛР
Раздел 5. Программный пакет Chem Office	Тема 5.1. Системы для графического ввода и рисования химических структур Chem Draw. Знакомство с программным пакетом ChemOffice. Химический редактор Chem Draw	ЛК
	Тема 5.2. ChemDraw. Запись схемы реакции с указанием реакционных центров	ЛР
	Тема 5.3. Hyper Chem. Построение и редактирование молекул. Создание небольших молекул в 2D и 3D.	ЛР
	Тема 5.4. Минимизация энергии системы. Моделирование динамики и состояния равновесия.	ЛР

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Компьютерный класс	Компьютерный класс для проведения занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная персональными компьютерами, доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Комплект специализированной мебели; стационарный мультимедийный проектор, стационарный экран Microsoft Win 10 Домашняя для одного языка, Код

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
		продукта № 00327-60000-00000-AA717. Microsoft Office 365 ProPlus Код продукта 00202-50232-17683-AA087
Для самостоятельной работы обучающихся	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Microsoft Win 10 Домашняя для одного языка, Код продукта № 00327-60000-00000-AA717. Microsoft Office 365 ProPlus Код продукта 00202-50232-17683-AA087

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Соловьёв М.Е., Соловьёв М.М. Компьютерная химия //2005. М.:САЛОН-Пресс
2. Нарышкин Д.Г. [Компьютерная математика в курсе «Физическая химия»](https://cyberleninka.ru/article/n/kompyuternaya-matematika-v-kurse-«Fizicheskaya-himiya») // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2012. Выпуск 8, С.430-440. [Электронный ресурс] <https://cyberleninka.ru/article/n/kompyuternaya-matematika-v-kurse-fizicheskaya-himiya>
3. Кларк Т. Компьютерная химия // 1990 М.:Мир. 383 с

Дополнительная литература:

1. Борбат В.Ф., Голованова О.А., Глухова О.В. [Расчетные компьютерные программы в химии](https://cyberleninka.ru/article/n/raschetnye-kompyuternye-programmy-v-himii) // Омский научный вестник, 2001. [Электронный ресурс] <https://cyberleninka.ru/article/n/raschetnye-kompyuternye-programmy-v-himii>
2. Компьютерная химия: методические указания / сост. Д. А. Базлов, В. Ю. Орлов, А. Д. Котов, А. В. Цивов; Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. — Ярославль : ЯрГУ, 2013. — 76 с.
3. Петров Павел Валерьевич, Сунарчин Роберт Авалевич, Целищев Владимир Александрович. Технология вычислительного эксперимента // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета , 2008. <https://cyberleninka.ru/article/n/tehnologiya-vychislitel'nogo-eksperimenta>
4. Шашков В.Б. [Компьютерная модель эксперимента](https://cyberleninka.ru/article/n/kompyuternaya-model-eksperimenta) // Вестник Оренбургского государственного университета , 2007. [Электронный ресурс] <https://cyberleninka.ru/article/n/kompyuternaya-model-eksperimenta>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН
<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru

- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>

- ЭБС «Троицкий мост»

- Химическая энциклопедия <http://www.chemport.ru>

- Портал фундаментального химического образования России
<http://www.chemnet.ru>

- XuMuK: сайт о химии для химиков www.xumuk.ru

- IOPSCIENCE IOP Publishing <http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>

- Mendeley <http://www.mendeley.com/>

- Nature <http://www.nature.com/siteindex/index.html>

- RSC, журналы Королевского химического общества (Royal Society of Chemistry) <http://pubs.rsc.org/>

- ScienceDirect (ESD) <http://www.sciencedirect.com>

- Электронные ресурсы издательства Springer <https://rd.springer.com/>

- Wiley Online Library <http://www.wileyonlinelibrary.com/>

2. Базы данных и поисковые системы:

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации
<http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>

- поисковая система Google <https://www.google.ru/>

- реферативная база данных SCOPUS

<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

- Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry <https://www.reaxys.com/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:

1. Методические указания по дисциплине «Компьютерные технологии в химии».

2. Методические указания по подготовке к тестам

3. Правила написания и оформления контрольных работ и домашних заданий

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Компьютерные технологии в химии» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

РАЗРАБОТЧИК:

Доцент кафедры физической и коллоидной химии

Должность, БУП



Подпись

ЛЯДОВ А.С.

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Кафедра физической и коллоидной химии

Наименование БУП



Подпись

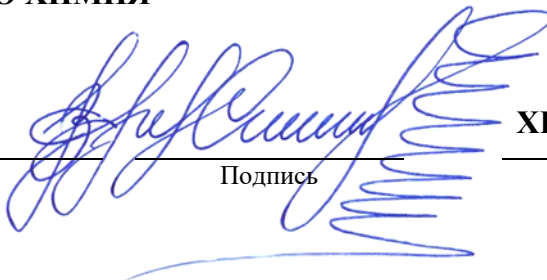
ЧЕРЕДНИЧЕНКО А.Г.

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО ХИМИЯ

Заведующий кафедрой неорганической химии

Должность, БУП



Подпись

ХРУСТАЛЕВ В.Н.

Фамилия И.О.