

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ястребов Олег Александрович  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 29.05.2023 14:18:39  
Уникальный программный ключ:  
ca953a0120d891083f939673078ef1a98>dae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»  
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)

**2023 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)*

<b>Шифр</b>	<b>Компетенция</b>	<b>Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)</b>
<b>УК-12</b>	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	<b>УК-12.1.</b> 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;
		<b>УК-12.2.</b> Проводит оценку информации, ее достоверность, строит логические умозаключения на основании поступающих информации и данных.
<b>ОПК-1</b>	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	<b>ОПК-1.1.</b> Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов, свойств веществ и материалов
		<b>ОПК-1.2.</b> Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии

<b>Шифр</b>	<b>Компетенция</b>	<b>Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)</b>
<b>ОПК-3</b>	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	<b>ОПК-3.1.</b> Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности;
		<b>ОПК-3.2.</b> Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.
<b>ОПК-5</b>	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	<b>ОПК-5.1.</b> Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля;
		<b>ОПК-5.2.</b> Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности.
<b>ОПК-7</b>	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.	<b>ОПК-7.1.</b> Применяет цифровые технологии для поиска, обработки и анализа научной информации в области химии;
		<b>ОПК-7.2.</b> Использует цифровые технологии для постановки исследовательских задач;
		<b>ОПК-7.3.</b> Анализирует экспериментальные данные и применяет вычислительные методы для решения поставленных задач;
		<b>ОПК-7.4.</b> Использует цифровые платформы для научных исследований.
<b>ПК-2</b>	Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	<b>ПК-2.1.</b> Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных);
		<b>ПК-2.1.</b> 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	<p>Способен:</p> <p>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;</p> <p>проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных</p>	Информатика	<p>Учебная практика</p> <p>Научно-исследовательская работа</p> <p>Преддипломная практика</p>
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	<p>Неорганическая химия</p> <p>Аналитическая химия</p> <p>Органическая химия</p>	<p>Химическая технология</p> <p>Строение вещества</p> <p>Основы квантовой химии</p> <p>Коллоидная химия</p> <p>Высокомолекулярные соединения</p> <p>Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа</p> <p>Хроматография</p> <p>Основы электронной и колебательной спектроскопии</p> <p>Основы ЯМР</p> <p>Основы масс-спектрометрии</p> <p>Химические основы биологических процессов</p> <p>Избранные главы химии</p> <p>Экспериментальные методы исследования в химии</p> <p>Учебная практика</p>

<b>Шифр</b>	<b>Наименование компетенции</b>	<b>Предшествующие дисциплины/модули, практики</b>	<b>Последующие дисциплины/модули, практики</b>
			Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
<b>ОПК-3</b>	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
<b>ОПК-5</b>	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
<b>ОПК-7</b>	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	Учебная практика Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
<b>ПК-2</b>	Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы		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 2 зачетные 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>	<b>36</b>	<b>36</b>			
в том числе:					
Лекции (ЛК)					
Лабораторные работы (ЛР)	36	36			
Практические/семинарские занятия (СЗ)					
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	18	18			
<i>Контроль (зачет с оценкой), ак.ч.</i>	18	18			
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	ак.ч.	<b>72</b>	<b>72</b>		
	зач.ед.	<b>2</b>	<b>2</b>		

#### 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Вид учебной работы*
<b>Раздел 1. Теоретические основы компьютерных технологий в химии.</b>	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
<b>Раздел 2. Табличные процессоры</b>	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
	Тема 2.3. Пакет Origin анализ и визуализация экспериментальных данных.	ЛР
	Тема 2.4. Управление пакетами и автоматизация операций с помощью VBA	ЛР
<b>Раздел 3. Компьютерные презентации</b>	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

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Вид учебной работы*
<b>Раздел 4. Информационные системы и базы данных</b>	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
<b>Раздел 5. Программный пакет Chem Office</b>	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 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](http://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](http://www.xumuk.ru)
  - IOPSCIENCE IOP Publishing <http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>
  - Mendeley <http://www.mendeley.com/>
  - 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

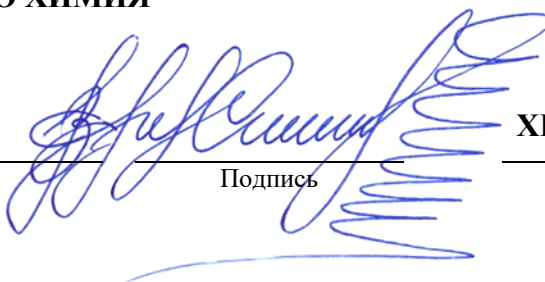
**ЧЕРЕДНИЧЕНКО А.Г.**

Фамилия И.О.

### РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО ХИМИЯ

**Заведующий кафедрой неорганической химии**

Должность, БУП



Подпись

**ХРУСТАЛЕВ В.Н.**

Фамилия И.О.