

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ С.А. ЕСЕНИНА»

Утверждаю:  
декан естественно-  
географического факультета



С.В. Жеглов  
«30» августа 2019 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

### Компьютерные технологии в химии

Уровень основной профессиональной образовательной программы  
магистратура

---

Направление подготовки 04.04.01 Химия

---

Направленность (профиль) Органическая химия

---

Форма обучения очная

---

Сроки освоения ОПОП Нормативный, 2 года

---

Факультет (институт) естественно-географический

---

Кафедра химии

---

Рязань, 2019

## **ВВОДНАЯ ЧАСТЬ**

### **1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

Целями освоения дисциплины Компьютерные технологии в химии являются: освоение студентами современных информационных технологий, технических средств и программного обеспечения, необходимых для научной и образовательной деятельности в информационном обществе. Формировать компетентность в использовании информационных технологий для решения практических задач в профессиональной области химии.

### **2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВУЗА**

2.1. Дисциплина Компьютерные технологии в химии относится к обязательной части Блока 1.

2.2. Для изучения данной дисциплины необходимы следующие предшествующие дисциплины: Информатика уровней образования бакалавриат или специалитет.

2.1. Перечень последующих дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной дисциплиной: служит информационной и методологической основой при изучении специальных дисциплин и подготовке магистерской диссертации.

## 2.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

Изучение данной дисциплины направлено на формирование у обучающихся общепрофессиональных (ОПК) компетенций:

№ п/п	Код и содержание компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
			Знать	Уметь	Владеть (навыками)
1	2	3	4	5	6
1.	<b>ОПК-1.</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	<b>ОПК-1.2.</b> Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук	основные тенденции развития современных информационных технологий, основы каждой из рассматриваемых компьютерных технологий современных способов применения компьютерных технологий в обучении и научных исследованиях и их роль в развитии общества, в выработке научного мировоззрения; основные возможности вычислительных систем; средства телекоммуникационного доступа к источникам научной информации; возможности сети Internet для организации оперативного обмена информацией между исследовательскими группами;	использовать современные компьютерные технологии, средства телекоммуникационного доступа к источникам научной информации, возможности сети Internet	профессиональными знаниями современных информационных систем и технологий, практическими навыками работы с вычислительными системами, с наиболее часто используемыми прикладными программными комплексами, методами получения, представления и обработки информации, навыками структурного программирования, построения эмпирических моделей с использованием пакетов программ статистической обработки данных, имитационного моделирования при решении проблем химической технологии и экологии; презентаций (ПК-9).

		<b>ОПК-1.3.</b> Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	применение методов математического моделирования в научных исследованиях с использованием пакетов программ обработки данных, готовых прикладных программных комплексов в области химии и смежных наук, с выбором методов решения поставленной задачи;	Использовать методы математического моделирования (с использованием пакетов программ обработки данных), готовые прикладные программные комплексы в области химии и смежных наук для планирования экспериментальной работы с целью выбора направления исследования по заданной теме, дизайна, прогностической интерпретации свойств материалов, обработки, анализа и представления полученных результатов в информационном виде и планирования экспериментальной работы;	способами обработки и анализа полученных результатов с учетом имеющихся литературных данных и умением представлять полученные в исследованиях и самостоятельной работе результаты в информационном виде;
2.	<b>ОПК-3.</b> Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	<b>ОПК-3.1.</b> Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля	системы сбора, обработки и хранения химической информации;	анализировать результаты математической обработки научных данных с целью определения их достоверности и области использования;	способами планирования стратегии предстоящего исследования;
		<b>ОПК-3.2.</b> Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	устройство и принципы обработки информации системами мультимедиа, с использованием систем деловой графики, интегрированных систем для проведения математических и инженерно-технических расчетов	пользоваться стандартными банками компьютерных программ и банками данных и уметь создавать авторские.	методами отбора материала для создания учебно-методического обеспечения преподавания химии в образовательных учреждениях высшего профессионального образования в виде электронных пособий, мультимедийных презентаций

		<b>ОПК-3.2.</b> Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	Использовать современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	Использования современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием
--	--	--	---	--	---

## ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

### 1. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		1	№	№	№
		часов	Часов	часов	часов
1	2	3	4	5	6
1. Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	36	36	-	-	-
В том числе:					
Лекции (Л)					
Практические занятия (ПЗ), Семинары (С)	36	36			
Лабораторные работы (ЛР)					
Иные виды занятий					
2. Самостоятельная работа студента (всего)	72	72			
3. Курсовая работа (при наличии)	КП				
	КР				
Вид промежуточной аттестации	зачет (З),	3	3		
	экзамен (Э)				
ИТОГО: общая трудоемкость	часов	108	108		
	зач. ед.	3	3		

### 2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

#### 2.1. Содержание разделов дисциплины (модуля)

№ семестра	№ раздела	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Содержание раздела в дидактических единицах
1	2	3	4
1	1.	Введение.	Информационные технологии. Информация в электронных сетях и ее использование. Каталоги и поисковые системы, характеристика основных поисковых систем. Расширенный поиск, язык запросов, поисковые команды. Специализированные поисковики. Тематические каталоги.
1	2.	Компьютерный перевод. Облачные сервисы.	Современные технологии компьютерного перевода. Программное обеспечение компьютерного перевода: электронные словари и переводчики Promt, Pragma и др. Интернет-сервисы: словари Яндекс, Google Translator. Перевод web-страниц и сайтов. Редактирование машинного перевода. Облачные вычисления: основные концепции развития облачных сервисов SaaS, IaaS, PaaS и их возможности. Характеристика возможностей облачных сервисов iCloud, Google Docs, Windows Live SkyDrive, Microsoft Office Web Apps. Специализированные химические ресурсы в облаках: редакторы формул, iLab.

1	3.	Химические редакторы и базы данных	Специализированные химические редакторы формул. Редактор ACD/Labs Chemskech: общая характеристика, создание углеводородных структур, их преобразование и копирование. Радикалы и группы атомов и Sd-моделей молекул. Использование библиотеки шаблонов. Режим Draw (Рисование): редактирование текста, создание графических объектов. Программа 3d-Viewer - создание анимированных моделей молекул. Специализированные базы данных в сети Интернет и их использование для поиска химической информации. Идентификаторы веществ: CAS registry number, SMILES, InChI, InChIKey. Учебные базы данных на сервере МГУ ChemNet. Базы данных PubChem, NIST Chemistry Webbook, Spectral Database for Organic Compounds (SDBS): поиск соединений по идентификаторам, формулам, названиям и структурам.
1	4.	Компьютерные технологии в исследованиях свойств и структуры вещества.	Природа и основные характеристики ЯМР-спектров, программы для их анализа и моделирования от фирмы ACD/Labs. Прогнозирование и анализ спектра в программах: ACD/Labs NMRViewer, gNMR, в он-лайн сервисе NMRShiftDB. Поиск структуры соединения по спектральным данным.
1	5.	Информационные технологии в учебном процессе средней и высшей школы.	ПО для локальных и сетевых образовательных продуктов. Системы электронного обучения, LMS (Learning Management System): Moodle, eFront. Веб-конференции и вебинары. Программное обеспечение для разработки тренажеров и тестов.

2.2. Перечень лабораторных работ (при наличии), примерная тематика курсовых работ (при наличии)

Не предусмотрены.

### 3. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТА

Самостоятельная работа осуществляется в объеме 72 часов. Видами СРС является подготовка к выполнению контрольного задания.

#### 4. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ (см. Фонд оценочных средств)

4.1. Рейтинговая система оценки знаний обучающихся по дисциплине (модулю) (при необходимости).

### 5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

5.1. Основная литература

№ п/п	Автор (ы), наименование, место издания и издательство, год
1	2
1.	Черткова, Е. А. Компьютерные технологии обучения : учебник для вузов / Е. А. Черткова. — 2-е изд., испр. и доп. — М. : Издательство Юрайт, 2017. — 297 с. — (Серия : Университеты России). — ISBN 978-5-534-01255-2

## 5.2. Дополнительная литература

№ п/п	Автор (ы), наименование, место издания и издательство, год
1	2
	Советов, Б.Я. Информационные технологии: теоретические основы [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Б.Я. Советов, В.В. Цехановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017.

## 5.3. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : научная электронная библиотека. — Доступ зарегистрированным пользователям по паролю. — Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 20.01.2020).
2. Лань [Электронный ресурс] : электронная библиотека. — Доступ к полным текстам по паролю. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 20.01.2020).
3. Научная библиотека РГУ имени С. А. Есенина [Электронный ресурс] : сайт. — Режим доступа: <http://library.rsu.edu.ru>, свободный (дата обращения: 20.01.2020).
4. Юрайт [Электронный ресурс] : электронная библиотека. — Доступ к полным текстам по паролю. — Режим доступа: <https://www.biblio-online.ru> (дата обращения: 20.01.2020).

## 5.4 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее – сеть «Интернет»), необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. ChemNet. Россия [Электронный ресурс] : химическая информационная сеть. — Режим доступа: [www.chemnet.ru](http://www.chemnet.ru), свободный (дата обращения: 20.01.2020).
2. ChemPort.Ru [Электронный ресурс] : портал. — Режим доступа: [www.chemport.ru](http://www.chemport.ru), свободный (дата обращения: 20.01.2020)
3. *ABC Chemistry* [Электронный ресурс] : бесплатный полнотекстовый каталог журналов по химии. — Режим доступа: <http://abc-chemistry.org/index.html>, свободный (дата обращения: 20.01.2020).
4. *ChemSpider* [Электронный ресурс] : база данных химических соединений и смесей, принадлежащая королевскому химическому обществу Великобритании. — Режим доступа: <http://www.chemspider.com/>, свободный (дата обращения: 20.01.2020).

## 6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)



Стандартно оборудованные аудитории для проведения интерактивных лекций: видеопроектор, экран настенный, др. оборудование. Компьютерный класс.

## 7. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Вид учебных занятий	Организация деятельности студента
Лекция	Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; пометить важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Проверка терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации, на практическом занятии. Уделить внимание следующим понятиям (перечисление понятий) и др.
Практические занятия	Проработка рабочей программы дисциплины, уделяя особое внимание целям и задачам, структуре и содержанию дисциплины. Конспектирование источников. Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам, просмотр рекомендуемой литературы, работа с текстом (указать текст из источника и др.), прослушивание аудио- и видеозаписей по заданной теме, решение расчетно-графических заданий, решений задач по алгоритму и др.
Коллоквиум	Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам и др.
Подготовка к экзамену	При подготовке к экзамену (зачету) необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу и др.

## 8. ТРЕБОВАНИЯ К ПРОГРАММНОМУ ОБЕСПЕЧЕНИЮ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА:

Название ПО	№ лицензии
MS Office 2007 russian acdmc open	45472941
MS Windows Professional Russian	47628906
LibreOffice	свободно распространяемая
7-zip	свободно распространяемая
FastStoneImageViewer	свободно распространяемая
FoxitReader	свободно распространяемая
doPdf	свободно распространяемая
VLC media player	свободно распространяемая
ImageBurn	свободно распространяемая
DjVu Browser Plug-in	свободно распространяемая

## 9. ИНЫЕ СВЕДЕНИЯ