

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Костромской государственный университет»
(КГУ)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ

Направление подготовки 04.03.01 Химия

Направленность Химия

Квалификация выпускника: бакалавр

**Кострома
2023**

Рабочая программа дисциплины «Информационные технологии в химии» разработана в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденному приказом МИНОБРНАУКИ РОССИИ от 17 июля 2017 г. № 671.

Разработал: Кусманов Сергей Александрович, директор ИФМЕН, д-р. техн. наук, доцент

Рецензент: Хитрова Валентина Ивановна, заместитель директора ФГБУ государственная станция агрохимической службы «Костромская», руководитель испытательной лаборатории, канд. с.-х. наук

ПРОГРАММА УТВЕРЖДЕНА:

На заседании кафедры химии:

Протокол заседания кафедры № 8 от 07.04.2023 г.

Заведующий кафедрой химии Кусманова Ирина Александровна, канд.пед.наук, доцент

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цель дисциплины: формирование готовности осуществлять профессиональную деятельность с использованием информационных технологий.

Задачи дисциплины:

- сформировать представления о специфике применения информационных технологий в химии;
- показать возможность применения информационных технологий в профессиональной деятельности.

Направление воспитания, связанные с содержанием дисциплины: профессионально-трудовое и научно-образовательное воспитание обучающихся посредством содержания дисциплины и актуальных воспитательных технологий.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины обучающийся должен освоить *компетенции:*

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

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать:

- основные области применения информационных технологий в профессиональной деятельности;
- программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

уметь:

- применять теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности с использованием современной вычислительной техники;
- использовать стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.

владеть:

- навыками использования информационных технологий при решении профессиональных задач.

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Дисциплина «Информационные технологии в химии» относится к обязательной части учебного плана. Изучается в 4 семестре обучения.

Дисциплины и иные компоненты ОП, формирующие указанные выше компетенции:

- ОПК-3 (способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники) формируется при освоении дисциплины «Информационные технологии в химии»; при подготовке к сдаче и при сдаче государственного экзамена.

4. Объем дисциплины (модуля)

4.1. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием академических часов и виды учебной работы

Виды учебной работы	Очная форма
Общая трудоемкость в зачетных единицах	3
Общая трудоемкость в часах	108

Аудиторные занятия в часах, в том числе:	72
Лекции	36
Практические занятия	-
Лабораторные занятия	36
Практическая подготовка	-
Самостоятельная работа в часах	35,75
Форма промежуточной аттестации	Зачет в 4 семестре (0,25 часа)

4.2. Объем контактной работы на 1 обучающегося

Виды учебных занятий	Очная форма
Лекции	36
Практические занятия	-
Лабораторные занятия	36
Консультации	-
Зачет (4 семестр)	0,25
Курсовая работа	-
Всего	72,25

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием количества часов и видов занятий

5.1 Тематический план учебной дисциплины

№ п/п	Название раздела, темы	Всего з.е/час	Аудиторные занятия		Самостоятельная работа
			Лекции	Лаборат.	
1	Введение. Основные понятия ИТ в химии. Молекулярное моделирование	0,22/8	6	-	2
2	Основные приемы конструирования молекул	0,39/14	4	6	4
3	Примеры молекулярного моделирования	0,39/14	4	6	4
4	Создание, открытие и импортирование молекулярных моделей	0,45/16	4	6	6
5	Конструирование и редактирование. Пространственные манипуляции с моделями	0,45/16	4	6	6
6	Информационные технологии и вычислительные концепции	0,50/18	6	6	6
7	Получение и обработка результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	0,60/21,75	8	6	7,75
	ИКР (зачет)	0,007/0,25	-	-	-
Итого:		3/108	36	36	35,75

5.2. Содержание

Тема 1. Введение. Основные понятия ИТ в химии. Молекулярное моделирование

Основные источники информации и поисковые системы по химии. Средства распространения, хранения, представления и обработки информации. Молекулярное моделирование. Работа с молекулярными моделями: создание моделей, открытие моделей, сохранение моделей, отказ от последних изменений модели, закрытие модели.

Тема 2. Основные приемы конструирования молекул

Модельное окно, внутренние и внешние таблицы, меню и команды, палитра инструментов, диалоговые окна и установки. Анатомия модели. Модельный дисплей, модельные данные, параметры конструирования, модельные таблицы.

Тема 3. Примеры молекулярного моделирования

Конструирование с использованием инструментов связи. Конструирование с использованием текстового строительного инструмента: замещение атомов, использование меток, использование подструктур. Конформационный анализ. Поисковая система для определения конформаций. Просмотр молекулярных поверхностей. Отображение свойств на поверхностях. Расчет парциальных зарядов.

Тема 4. Создание, открытие и импортирование молекулярных моделей

Обзор. Создание пустой модели. Создание модели предварительно конфигурированного документа. Открытие существующего файла. Импортирование модели.

Тема 5. Конструирование и редактирование. Пространственные манипуляции с моделями

Концепции конструирования. Конструирование с помощью инструментов. Конструирование с помощью текстовой панели инструментов. Замещение атома на подструктуру, на другой элемент, на другой атомный тип. Изменение связей. Добавление фрагментов. Установка измеряемых параметров: длин связей, углов, ограничений, зарядов, порядковых номеров. Изменение стереохимии. Выделение объекта «щелчком»: Выделение подряда атомов. Определение группы. Перемещение атомов или моделей. Вращения. Изменение ориентации. Масштабирование.

Тема 6. Информационные технологии и вычислительные концепции. Компьютерная химия. Обзор вычислительных методов. Молекулярная механика. Квантово-механическая теория: полуэмпирические методы. Запуск MM2. Повтор MM2 результатов. Запуск MM2. Минимизация энергии: расчеты сравнения конформаций, молекулярная динамика. Расчет свойств.

Тема 7. Получение и обработка результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий

Предоставление научной информации с помощью таблиц, графиков и диаграмм. Выявление на основе экспериментальных данных математических зависимостей.

6. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

6.1. Самостоятельная работа обучающихся по дисциплине (модулю)

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Задание	Часы	Методические рекомендации по выполнению задания	Форма контроля
1.	Введение. Основные понятия ИТ в химии. Молекулярное моделирование	Проработка лекционного материала	2	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
2.	Основные приемы	Проработка	2	Обзор и анализ	Устный опрос

	конструирования молекул	лекционного материала		литературы	
		Подготовка к лабораторным работам и оформление отчета по ним	2	Описаны в п. 6.3	Защита лабораторной работы
3.	Примеры молекулярного моделирования	Проработка лекционного материала	2	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Подготовка к лабораторным работам и оформление отчета по ним	2	Описаны в п. 6.3	Защита лабораторной работы
4.	Создание, открытие и импортирование молекулярных моделей	Проработка лекционного материала	3	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Подготовка к лабораторным работам и оформление отчета по ним	3	Описаны в п. 6.3	Защита лабораторной работы
5.	Конструирование и редактирование. Пространственные манипуляции с моделями	Проработка лекционного материала	3	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Подготовка к лабораторным работам и оформление отчета по ним	3	Описаны в п. 6.3	Защита лабораторной работы
6.	Информационные технологии и вычислительные концепции	Проработка лекционного материала	3	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Подготовка к лабораторным работам и оформление отчета по ним	3	Описаны в п. 6.3	Защита лабораторной работы
7.	Получение и обработка результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	Проработка лекционного материала	3	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Подготовка к лабораторным работам и оформление отчета по ним	4,75	Описаны в п. 6.3	Защита лабораторной работы

6.2. Тематика и задания для практических занятий (при наличии)

Практические занятия отсутствуют

6.3. Тематика и задания для лабораторных занятий (при наличии)

Лабораторные занятия проводятся по графику проведения лабораторных работ.

Ниже приведены примерные планы лабораторных занятий.

Лабораторная работа 1.

Тема: Реакционные схемы. Конструирование интермедиатов. Использование циклических структур. Анализ физико-химических свойств молекул.

Обсуждаемые вопросы: основные понятия и определения; инструменты, программное обеспечение, типы связей (простые, двойные, тройные, дативные, донорно-акцепторные), геометрия молекул, анализ свойств, запись информации.

Лабораторная работа 2.

Тема: Проекция Фишера. Конструирование структурных формул в перспективе. Проекция Ньюмена. Анализ физико-химических свойств молекул.

Обсуждаемые вопросы: основные понятия и определения; инструменты, программное обеспечение, типы связей (простые, двойные, тройные, дативные, донорно-акцепторные), геометрия молекул, анализ свойств, криволинейные системы координат.

Лабораторная работа 3.

Тема: Анатомия 3D-молекулярных моделей. Модельный дисплей. Задание инструментов и молекулярных параметров.

Обсуждаемые вопросы: запуск молекулярных программ, структурный графический интерфейс, обмен внутренней и внешней структурной молекулярной информацией, компьютерные меню и команды, диалоговые окна и начальные установки. Анатомия молекулярных моделей и модельные таблицы, задание атомно-молекулярных координат.

Лабораторная работа 4.

Тема: Конструирование молекулярных систем с использованием инструментария химических связей, текстового процессора, атомно-молекулярных меток, компьютерного банка данных молекулярных подструктур.

Обсуждаемые вопросы: инспектирование 3D-моделей (длины связей, углы между связями, произвольные межатомные расстояния, торсионные углы), молекулярное вращение в декартовых координатах (вокруг выбранного направления, произвольное вращение), перенумерация модели, текстовый процессор, атомные метки и молекулярные подструктуры (ибупрофен, аминокислотные белковые последовательности).

Лабораторная работа 5.

Тема: Конформационный анализ молекулярных и супрамолекулярных структур. Поиск стационарных конформаций.

Обсуждаемые вопросы: модельное окно и режимы анимации молекулярных структур, внутреннее вращение функциональных групп, поиск оптимальных конформаций, расчет физико-химических свойств и путей химических реакций. Поиск стационарных конформаций.

Лабораторная работа 6.

Тема: Компьютерный обмен с другими платформами и программным обеспечением. Визуализация структур и физико-химических данных. Картирование свойств и молекулярных поверхностей.

Обсуждаемые вопросы: взаимопередача информации. Картирование молекулярных поверхностей по Коннолли, по электронной плотности граничных орбиталей, по молекулярной доступности, по спиновой электронной плотности. Расчет химической топологии и молекулярных данных по феноменологии и квантовым методам.

Лабораторная работа 7.

Тема: Получение и обработка результатов научных экспериментов с помощью

современных компьютерных технологий.

Обсуждаемые вопросы: Способы предоставления научной информации с помощью таблиц, графиков и диаграмм. Выявление на основе экспериментальных данных математических зависимостей с использованием компьютерных технологий. Проведение первичного анализа экспериментальных данных.

На лабораторных занятиях студенты определяют и утверждают у преподавателя направление работы, содержание и форму представления. Основной поиск информации и итоговая подготовка отчета осуществляется самостоятельно во внеаудиторные часы.

6.4. Методические рекомендации для выполнения курсовых работ (проектов) при наличии

Курсовые работы отсутствуют

7. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная

1. **Исакова, А.И.** Информационные технологии : учебное пособие / А.И. Исакова, М.Н. Исаков ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Томский Государственный Университет Систем Управления и Радиоэлектроники (ТУСУР). - Томск : Эль Контент, 2012. - 174 с. : ил.,табл., схем. - ISBN 978-5-4332-0036-4 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208647>
2. **Информационные технологии** : учебник / Ю.Ю. Громов, И.В. Дидрих, О.Г. Иванова, и др. ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Тамбовский государственный технический университет». - Тамбов : Издательство ФГБОУ ВПО «ТГТУ», 2015. - 260 с. : ил., табл., схем. - Библиогр. в кн.. - ISBN 978-5-8265-1428-3 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=444641>
3. Современные компьютерные технологии : учебное пособие / Р.Г. Хисматов, Р.Г. Сафин, Д.В. Тунцев, Н.Ф. Тимербаев ; Министерство образования и науки России, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет». - Казань : Издательство КНИТУ, 2014. - 83 с. : схем. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-7882-1559-4 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=428016>
4. **Онокой Л. С.** Компьютерные технологии в науке и образовании: Учебное пособие / Л.С. Онокой, В.М. Титов. - М.: ИД ФОРУМ: ИНФРА-М, 2011. - 224 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование). (переплет) ISBN 978-5-8199-0469-5 –**znanium.kom**

Дополнительная литература

1. Информационные технологии в образовании : учебное пособие / Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Северо-Кавказский федеральный университет», Министерство образования и науки Российской Федерации ; сост. В.В. Журавлев. - Ставрополь : СКФУ, 2014. - 102 с. : ил. - Библиогр. в кн. ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=457341>
2. **Диков, А.В.** Компьютерные технологии : учебное пособие / А.В. Диков. - Пенза : ПГПУ, 2005. - 306 с. : ил.,табл., схем. ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=96975>

3. **Марков, В.В.** Компьютерные технологии в науке и образовании : учеб. пособие. Ч. 1 / Марков, Владимир Васильевич, Ю. А. Кравченко ; Минобрнауки РФ [и др.]. - Таганрог : ТРТУ, 2006. - 133 с. - Библиогр.: с. 127-129. - 30.00.
4. **Соловьев, М. Е.** Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. - М. : СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Электронно-библиотечные системы:

- ЭБС Университетская библиотека онлайн, путь доступа <http://biblioclub.ru>;
- ЭБС «Znanium», путь доступа <http://znanium.com/>.

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

- Web of Science, путь доступа: <http://webofscience.com>;
- Scopus, путь доступа: <https://www.scopus.com>;
- РИНЦ, путь доступа: <https://elibrary.ru>;
- СПС КонсультантПлюс;
- ФГБУ «Президентская библиотека имени Б.Н. Ельцина»;
- Аннотированная библиографическая база данных журнальных статей MAPC.

9. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
Аудитория для занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Специализированная мебель; мультимедийный проектор; рабочее место преподавателя, оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; экран переносной; доска меловая; учебно-наглядные пособия, обеспечивающие наглядные иллюстрации; наборы демонстрационного оборудования	Windows XP по лицензии OEM Software (поставщик ООО «Системный интегратор», договор № 22 ГК от 16.12.2016 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Аудитория для занятий лекционного и семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Специализированная мебель; рабочее место преподавателя; учебно-наглядные пособия, обеспечивающие наглядные иллюстрации; мультимедийный проектор; ноутбук; доска меловая	Windows Pro 8.1 (поставщик ООО Софт-лайт Проекты, договор №50155/ЯР4393 от 12.12.2014 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Аудитория для занятий семинарского типа (компьютерный класс), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Специализированная мебель; рабочие места, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; рабочее место преподавателя; доска меловая	Windows Pro 8.1 (поставщик ООО Софт-лайт Проекты, договор №50155/ЯР4393 от 12.12.2014 г.); MathCAD Education (поставщик ООО ЮнитАльфаСофт, договор №208/13 от 10.06.2013 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Аудитория для занятий семинарского типа	Специализированная мебель; рабочие места, оснащенные компьютерной	Windows 7 Professional по лицензии DreamSpark Premium (поставщик ООО

(компьютерный класс), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; рабочее место преподавателя; доска меловая	Форвард Софт Бизнес, договор 6-ЭА-2014 от 31.10.2014); MathCAD Education (поставщик ООО ЮнитАльфаСофт договор №208/13 от 10.06.2013); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Помещение для самостоятельной работы обучающихся	Специализированная мебель; рабочие места, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; демонстрационная LCD-панель; принтеры, в т.ч. большеформатный и цветной; сканеры (форматы А2 и А4); web-камеры; микрофоны	Windows XP по лицензии OEM Software (поставщик ООО «Системный интегратор», договор № 22 ГК от 16.12.2016 г.); АИБС «Марк-SQL» (поставщик НПО «Информ-система», договор № 260420060420 от 26.04.2006 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Помещение для самостоятельной работы обучающихся	Специализированная мебель; рабочие места, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; доска меловая	Windows Pro 8.1 (поставщик ООО Софт-лайт Проекты, договор №50155/ЯР4393 от 12.12.2014 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)

Лист актуализации рабочей программы дисциплины

В рабочую программу дисциплины внесены следующие изменения:

1. Обновлен перечень лицензионного программного обеспечения;
2. Обновлен перечень материально-технического обеспечения;
3. Обновлен перечень основной и дополнительной литературы.