

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Муромский институт (филиал)
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования
**«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»**
(МИ ВлГУ)

Кафедра *ТБ*

«УТВЕРЖДАЮ»
Заместитель директора по УР
_____ Д.Е. Андрианов
_____ 23.05.2023

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерная химия

Направление подготовки

18.03.01 Химическая технология

Профиль подготовки

*Химическая технология неорганических
веществ*

Семестр	Трудоем- кость, час./зач. ед.	Лек- ции, час.	Практи- ческие занятия, час.	Лабора- торные работы, час.	Консультация, час.	Конт- роль, час.	Всего (контакт- ная работа), час.	СРС, час.	Форма промежу- точного контроля (экз., зач., зач. с оц.)
6	108 / 3	16	32	16	1,6	0,25	65,85	42,15	Зач.
Итого	108 / 3	16	32	16	1,6	0,25	65,85	42,15	

Муром, 2023 г.

1. Цель освоения дисциплины

Цели дисциплины: приобретение знаний о сферах применения компьютерных технологий в решении научных задач.

Задачи дисциплины: формирование представлений об областях применения компьютерных технологий в научных химических исследованиях.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Для изучения дисциплины «Компьютерная химия» необходимо знание по дисциплинам «Информатика», «Применение компьютерных технологий в химической промышленности», «Системы автоматизированного проектирования», «Научно-исследовательская работа студента». Полученные студентами знания и умения могут быть использованы при выполнении бакалаврской работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине, в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	
ОПК-6 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-6.2 Применяет на практике информационные технологии для решения практических задач в профессиональной деятельности	умеет применять на практике информационные технологии для решения практических задач в профессиональной деятельности (ОПК-6.2)	вопросы к устному опросу

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

4.1. Форма обучения: очная

Уровень базового образования: среднее общее.

Срок обучения 4г.

4.1.1. Структура дисциплины

№ п\п	Раздел (тема) дисциплины	Семестр	Контактная работа обучающихся с педагогическим работником							Самостоятельная работа	Форма текущего контроля успеваемости (по неделям семестра), форма промежуточной аттестации(по семестрам)
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Контрольные работы	КП / КР	Консультация	Контроль		
1	Онлайновые текстовые научные базы данных	6	10							18	устный опрос
2	Онлайновые структурные базы данных	6	6	32	16					24,15	устный опрос
Всего за семестр		108	16	32	16			1,6	0,25	42,15	Зач.
Итого		108	16	32	16			1,6	0,25	42,15	

4.1.2. Содержание дисциплины

4.1.2.1. Перечень лекций

Семестр 6

Раздел 1. Онлайновые текстовые научные базы данных

Лекция 1.

Универсальные поисковые средства и вспомогательные инструменты (2 часа).

Лекция 2.

Научные журналы (2 часа).

Лекция 3.

Нежурнальные рецензируемые публикации (2 часа).

Лекция 4.

Репозитории электронных публикаций (2 часа).

Лекция 5.

Вторичные источники научной информации (2 часа).

Раздел 2. Онлайновые структурные базы данных

Лекция 6.

Патентные базы данных (2 часа).

Лекция 7.

Нормативные документы (2 часа).

Лекция 8.

Справочные базы данных (2 часа).

4.1.2.2. Перечень практических занятий

Семестр 6

Раздел 2. Онлайн-структурные базы данных

Практическое занятие 1

Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online (2 часа).

Практическое занятие 2

Crystallography Open Database (2 часа).

Практическое занятие 3

Кристаллографическая база данных CrystalEye (2 часа).

Практическое занятие 4

Cambridge Structural Database (2 часа).

Практическое занятие 5

Inorganic Crystal Structure Database (2 часа).

Практическое занятие 6

Трехмерная визуализация кристаллических структур в Mercury (2 часа).

Практическое занятие 7

Работа с кодами InChI и SMILES (2 часа).

Практическое занятие 8

Библиографическая база данных ChemSynthesis (2 часа).

Практическое занятие 9

Методики синтеза органических веществ ChemSpider SyntheticPages (2 часа).

Практическое занятие 10

Работа с журналом кратких тематических обзоров новых методов получения органических веществ Organic Chemistry Portal (2 часа).

Практическое занятие 11

Методики синтеза органических веществ Organic Syntheses (2 часа).

Практическое занятие 12

Работа со спектральной информацией ChemSpider (2 часа).

Практическое занятие 13

Ядерный магнитный резонанс (2 часа).

Практическое занятие 14

Spectral Database for Organic Compounds (2 часа).

Практическое занятие 15

Масс-спектрометрия (2 часа).

Практическое занятие 16

Масс-спектры в SDBS (2 часа).

4.1.2.3. Перечень лабораторных работ

Семестр 6

Раздел 2. Онлайн-структурные базы данных

Лабораторная 1.

ACD/ChemSketch (4 часа).

Лабораторная 2.

ACD/ChemSketch: режим Structure (4 часа).

Лабораторная 3.

ACD/ChemSketch. Режим Draw (4 часа).

Лабораторная 4.

ACD/3D Viewer (4 часа).

4.1.2.4. Перечень тем и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы

Перечень тем, вынесенных на самостоятельное изучение:

1. Терминология Интернета. Проблема достоверности онлайн-ресурсов. Первоисточник и интерпретация.

2. Стандартные приемы формальной оценки степени достоверности онлайн-информационного источника. Вспомогательные инструменты информационного поиска.
3. Синтаксис запроса в текстовых базах данных. Структура текстовой базы данных: запись, поле, вспомогательные указатели (индексы).
4. Первичные и вторичные источники научной информации по химии. Научный журнал. Научная статья. Препринт, постпринт. Материалы конференции.
5. Поиск и анализ химической информации на сайтах научных журналов. Порталы ScienceDirect, SpringerLink, Wiley Online Library. Сайты издательств American Chemical Society, Royal Society of Chemistry, МАИК Наука /Interperiodica. Инструменты обнаружения онлайн-журналов (Genamics JournalSeek, ABC-Chemistry и др).
6. Нежурнальные первичные информационные источники. Базы данных с материалами диссертаций. Электронные библиотеки.
7. Специализированные поисковые системы. Google Book Search. Библиографические и реферативные базы данных. Агрегаторы J-STAGE, SCIELO, PubMed Central, EBSCOhost, IngentaConnect, DOAJ, eLibrary, INIS. Реферативный журнал "Химия". Специализированная поисковая система Google Scholar.

Для самостоятельной работы используются методические указания по освоению дисциплины и издания из списка приведенной ниже основной и дополнительной литературы.

4.1.2.5. Перечень тем контрольных работ, рефератов, ТР, РГР, РПР

Не планируется.

4.1.2.6. Примерный перечень тем курсовых работ (проектов)

Не планируется.

5. Образовательные технологии

В процессе изучения дисциплины применяется контактная технология преподавания (за исключением самостоятельно изучаемых студентами вопросов). При проведении лабораторных и практических работ применяется имитационный или симуляционный подход. Шаги решения задач студентам демонстрируются при помощи мультимедийной техники. В дальнейшем студенты самостоятельно решают аналогичные задания.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Фонды оценочных материалов (средств) приведены в приложении.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

7.1. Основная учебно-методическая литература по дисциплине

1. Бутырская, Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е. В. Бутырская. — Москва : СОЛОН-ПРЕСС, 2017. — 224 с. - <http://www.iprbookshop.ru/90299>
2. Белащенко, Д. К. Компьютерные методы в физике и физической химии : лабораторный практикум / Д. К. Белащенко. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2012. — 109 с. - <http://www.iprbookshop.ru/56068>

7.2. Дополнительная учебно-методическая литература по дисциплине

1. Граничин, О. Н. Информационные технологии в управлении : учебное пособие / О. Н. Граничин, В. И. Кияев. — 3-е изд. — Москва, Саратов : Интернет-Университет Информационных Технологий (ИНТУИТ), Ай Пи Ар Медиа, 2020. — 400 с. - <http://www.iprbookshop.ru/89437>
2. Компьютерные методы математических исследований : методические указания к самостоятельной работе по дисциплинам «Численные методы» и «Компьютерное

моделирование» / составители Ю. Д. Ермаков. — Липецк : Липецкий государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2013. — 30 с. - <https://www.iprbookshop.ru/55102>

3. 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. - <http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20130304.pdf>

7.3. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

В образовательном процессе используются информационные технологии, реализованные на основе информационно-образовательного портала института (www.mivlgu.ru/iop), и инфокоммуникационной сети института:

- предоставление учебно-методических материалов в электронном виде;
- взаимодействие участников образовательного процесса через локальную сеть института и Интернет;
- предоставление сведений о результатах учебной деятельности в электронном личном кабинете обучающегося.

Информационные справочные системы:

ЦИТфорум - <http://citforum.ru/>

Журнал "Информатика и системы управления" <http://ics.khstu.ru/>

Программное обеспечение:

LibreOffice (Mozilla Public License v2.0)

Google Chrome (Лицензионное соглашение Google)

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

iprbookshop.ru

lib.uniyar.ac.ru

citforum.ru

ics.khstu.ru

mivlgu.ru/iop

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лекционная аудитория

проектор NEC Projector MP40G; ноутбук HP.

Компьютерный класс

10 компьютеров Intel Core i3-2100; 5 компьютеров Pentium CPU G4620, 3.70 GHz.

9. Методические указания по освоению дисциплины

Для успешного освоения теоретического материала обучающийся: знакомится со списком рекомендуемой основной и дополнительной литературы; уточняет у преподавателя, каким дополнительным пособиям следует отдать предпочтение; ведет конспект лекций и прорабатывает лекционный материал, пользуясь как конспектом, так и учебными пособиями.

На практических занятиях пройденный теоретический материал подкрепляется решением задач по основным темам дисциплины. Занятия проводятся в компьютерном классе, используя специальное программное обеспечение. Каждой подгруппе обучающихся преподаватель выдает задачу, связанную с использованием современных информационных технологий. В конце занятия обучающие демонстрируют полученные результаты преподавателю и при необходимости делают работу над ошибками.

До выполнения лабораторных работ обучающийся изучает соответствующий раздел теории. Перед занятием студент знакомится с описанием заданий для выполнения работы, внимательно изучает содержание и порядок проведения лабораторной работы. Лабораторная работа проводится в компьютерном классе. Обучающиеся выполняют индивидуальную задачу компьютерного моделирования в соответствии с заданием на лабораторную работу. Полученные результаты исследований сводятся в отчет и защищаются по традиционной методике в классе на следующем лабораторном занятии. Необходимый теоретический материал, индивидуальное задание, шаги выполнения лабораторной работы и требование к отчету приведены в методических указаниях, размещенных на информационно-образовательном портале института.

Самостоятельная работа оказывает важное влияние на формирование личности будущего специалиста, она планируется обучающимся самостоятельно. Каждый обучающийся самостоятельно определяет режим своей работы и меру труда, затрачиваемого на овладение учебным содержанием дисциплины. Он выполняет внеаудиторную работу и изучение разделов, выносимых на самостоятельную работу, по личному индивидуальному плану, в зависимости от его подготовки, времени и других условий.

Форма заключительного контроля при промежуточной аттестации – зачет. Для проведения промежуточной аттестации по дисциплине разработаны фонд оценочных средств и балльно-рейтинговая система оценки учебной деятельности студентов. Оценка по дисциплине выставляется в информационной системе и носит интегрированный характер, учитывающий результаты оценивания участия студентов в аудиторных занятиях, качества и своевременности выполнения заданий в ходе изучения дисциплины и промежуточной аттестации.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению
18.03.01 Химическая технология и профилю подготовки *Химическая технология
неорганических веществ*
Рабочую программу составил *к.т.н., доцент Шарапов Р.В.*_____

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры *ТБ*

протокол № 17 от 23.05.2023 года.

Заведующий кафедрой *ТБ* _____*Шарапов Р.В.*

(Подпись)

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической
комиссии факультета

протокол № 6 от 23.05.2023 года.

Председатель комиссии МСФ _____*Калиниченко М.В.*

(Подпись)

(Ф.И.О.)

Фонд оценочных материалов (средств) по дисциплине
Компьютерная химия

1. Оценочные материалы для проведения текущего контроля успеваемости по дисциплине

Перечень вопросов для текущего контроля знаний

1. Правила формулирования текстового запроса. Операторы, шаблоны. Учет словоформ. Поисковые бланки. Формы сортировки списка результатов поиска.
2. Структура баз данных издательств American Chemical Society, Royal Society of Chemistry, Elsevier, Springer, Wiley-Blackwell. Извлечь список работ заданного автора. Проанализировать структуру одной из статей.
3. Найти научную статью по заданному краткому библиографическому описанию. Сформировать полное библиографическое описание этой статьи в соответствии с ГОСТом.
4. Агрегатор EBSCOhost. Приемы информационного поиска в этой базе данных, в том числе, с использованием указателей.
5. Область использования баз данных INIS, PubMed Central в информационном поиске.
6. Особенности информационного поиска в Google Scholar.
7. Извлечь список патентов заданной тематики (база данных espacenet). Проанализировать структуру одного из патентов.
8. Извлечь Государственный стандарт заданной тематики.
9. Количественные характеристики опасности химического вещества. Обнаружение заданного сертификата безопасности.
10. Инструменты обнаружения достоверных значений термодинамических величин.
11. Регистрационные номера веществ. Принципы использования CAS RN.
12. Способы отображения молекулярного графа.
13. Линейные нотации. SMILES.
14. Линейные нотации. InChI, InChIKey.
15. Матричная форма отображения молекулярного графа.
16. Таблица соединений (сопряжений).
17. Файлы обмена структурной информацией.
18. Структурный код. Одномерные отпечатки пальцев в структурном поиске.
19. Визуальное отображение трехмерной структуры.
20. Молекулярная поверхность.
21. Декартовы и внутренние координаты химических структур.
22. Стандартный формат обмена кристаллографической информацией.
23. Молекулярные дескрипторы. "Правило пяти" Липинского.
24. Понятие о QSAR. Понятие о молекулярном докинге.
25. Молекулярное подобие, его количественная оценка.
26. Понятие о фармакофоре.

Общее распределение баллов текущего контроля по видам учебных работ для студентов

Рейтинг-контроль 1	5 практических работ, 1 лабораторная работа	16
Рейтинг-контроль 2	6 практических работ, 1 лабораторная работа	24
Рейтинг-контроль 3	6 практических работ, 2 лабораторных работы	24
Посещение занятий студентом		16

Дополнительные баллы (бонусы)		5
Выполнение семестрового плана самостоятельной работы		15

2. Промежуточная аттестация по дисциплине

Перечень вопросов к экзамену / зачету / зачету с оценкой.

Перечень практических задач / заданий к экзамену / зачету / зачету с оценкой (при наличии)

Перечень вопросов

ОПК-6

Блок 1 (знать).

1. Линейные нотации. SMILES.
2. Линейные нотации. InChI, InChIKey.
3. Матричная форма отображения молекулярного графа.
4. Таблица соединений (сопряжений).
5. Файлы обмена структурной информацией.
6. Структурный код. Одномерные отпечатки пальцев в структурном поиске.
7. Визуальное отображение трехмерной структуры.
8. Молекулярная поверхность.
9. Декартовы и внутренние координаты химических структур.
10. Стандартный формат обмена кристаллографической информацией.
11. Молекулярные дескрипторы. "Правило пяти" Липинского.
12. Понятие о QSAR. Понятие о молекулярном докинге.
13. Молекулярное подобие, его количественная оценка.
14. Понятие о фармакофоре.
15. Правила формулирования текстового запроса. Операторы, шаблоны. Учет словоформ. Поисковые бланки. Формы сортировки списка результатов поиска.
16. Структура баз данных издательств American Chemical Society, Royal Society of Chemistry, Elsevier, Springer, Wiley-Blackwell. Извлечь список работ заданного автора. Проанализировать структуру одной из статей.
17. Найти научную статью по заданному краткому библиографическому описанию. Сформировать полное библиографическое описание этой статьи в соответствии с ГОСТом.
18. Агрегатор EBSCOhost. Приемы информационного поиска в этой базе данных, в том числе, с использованием указателей.
19. Область использования баз данных INIS, PubMed Central в информационном поиске.
20. Особенности информационного поиска в Google Scholar.
21. Извлечь список патентов заданной тематики (база данных espacenet). Проанализировать структуру одного из патентов.
22. Извлечь Государственный стандарт заданной тематики.
23. Количественные характеристики опасности химического вещества. Обнаружение заданного сертификата безопасности.
24. Инструменты обнаружения достоверных значений термодинамических величин.
25. Регистрационные номера веществ. Принципы использования CAS RN.
26. Способы отображения молекулярного графа.

Блок 2 (уметь).

1. Сколько химических объектов в базе данных ChemSpider имеет точно такой же структурный остов, какой имеется у простейшей аминокислоты?
2. Создайте трехмерную модель молекулы оксида фосфора(V).
3. В ChemSketch изобразите двумерную структурную формулу уксусной кислоты.

4. Проведите 3D-оптимизацию изображенной ранее структурной формулы уксусной кислоты.
5. Извлеките ЯМР-спектры бензоат-иона
6. Под каким углом карбоксильные группы развернуты по оси C—C друг относительно друга?
7. Какова форма иона аммония?
8. Каков валентный угол НОН в молекуле воды?
9. Определите, каким химическим объектам принадлежат коды CAS RN, имеющиеся в той записи, которая соответствует воде.

Блок 3 (владеть).

1. Найдите в базе данных и выведите на экран ^1H -NMR-спектр бромэтана
2. Провести поиск заданного вещества в кристаллографической базе данных и определить численные значения длин связей и валентных углов.
3. Провести структурный поиск заданного вещества в структурной базе данных. Найти методику синтеза этого вещества, проанализировать текст обнаруженного первоисточника.
4. По заданному спектру протонного магнитного резонанса идентифицировать вещество (база данных SDBS).
5. Найдите информацию о структуре гидрата оксалата аммония
6. Найдите информацию о способе получения $\text{CH}_3\text{-S-S-CH}_3$ из CH_3SH .
7. Найдите значения химического сдвига для протонов в метилацетате
8. Найдите значения химического сдвига протонов уксусной кислоты
9. Найдите значения химического сдвига протонов 2-хлорпропана

Методические материалы, характеризующие процедуры оценивания

Индивидуальный семестровый рейтинг студента формируется на основе действующего в ВУЗе Положения "О проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся".

В течение семестра студент получает баллы успеваемости за выполнение всех видов учебных поручений: посещение лекций, выполнение лабораторных и практических работ. Зачет выставляется в случае, если итоговая оценка студента составляет не менее 50 баллов.

Максимальная сумма баллов, набираемая студентом по дисциплине равна 100.

Оценка в баллах	Оценка по шкале	Обоснование	Уровень сформированности компетенций
Более 80	«Отлично»	Содержание курса освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы, все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному	Высокий уровень
66-80	«Хорошо»	Содержание курса освоено полностью, без пробелов, некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно, все	Продвинутый уровень

		предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения ни одного из них не оценено минимальным числом баллов, некоторые виды заданий выполнены с ошибками	
50-65	«Удовлетворительно»	Содержание курса освоено частично, но пробелы не носят существенного характера, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы, большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий выполнено, некоторые из выполненных заданий, возможно, содержат ошибки	<i>Пороговый уровень</i>
Менее 50	«Неудовлетворительно»	Содержание курса не освоено, необходимые практические навыки работы не сформированы, выполненные учебные задания содержат грубые ошибки	<i>Компетенции не сформированы</i>

3. Задания в тестовой форме по дисциплине

Примеры заданий:

1. Что такое структурный поиск молекулярной структуры
 - а) это поиск молекулярной структуры по ее коду InChI
 - б) это поиск молекулярной структуры по ее коду SMILES
 - в) это поиск молекулярной структуры по ее графическому представлению
 - г) это поиск молекулярной структуры по ее текстовому описанию

2. С какой целью были разработаны коды InChI и SMILES
 - а) научному сообществу необходима полная информация о новейших разработках в области химических структур
 - б) научному сообществу необходима 3D-визуализация химических структур и различных соединений
 - в) научному сообществу необходима стандартное линейное представление химических структур различных соединений
 - г) научному сообществу необходимы базы данных всех химических структур и различных соединений

3. Для чего используется программа 3D Viewer пакета программ ACD/Labs Freeware
 - а) для проведения расчетов параметров химических структур
 - б) для создания проектной документации
 - в) для объемной визуализации химических структур
 - г) для поиска информации о химической структуре

4. Распределение энергии, характеризующей рассеивание электромагнитного излучения образцом вещества по длинам волн или частотам - ...

5. Информационный центр, в котором собраны комплекты журналов разных издательств

- ...

Полный перечень тестовых заданий с указанием правильных ответов, размещен в банке вопросов на информационно-образовательном портале института по ссылке <https://www.mivlgu.ru/iop/question/edit.php?courseid=178&category=20952%2C1535&qshowtext=0&recurse=0&recurse=1&showhidden=0>

Оценка рассчитывается как процент правильно выполненных тестовых заданий из их общего числа.