

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова**

Кафедра органической и биологической химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А. Маракаев  
«20» мая 2021 г.

**Рабочая программа**  
**«Компьютерная химия»**

Направление подготовки  
04.06.01 «Химические науки»

Направленность (профиль)  
«Органическая химия»

Форма обучения  
очная

Программа одобрена  
на заседании кафедры  
от «11» мая 2021 года, протокол № 13

Ярославль

**1. Целями** освоения дисциплины «Компьютерная химия» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:

- ознакомление аспирантов с основными направлениями применения компьютерных технологий в химии

## 2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Данная дисциплина относится к разделу дисциплин по выбору (Б1.В.ДВ.2.2).

Дисциплина «Компьютерная химия» показывает пути оптимизации химического эксперимента, сбора и обработки химической информации, обработки и интерпретации результатов эксперимента.

Для изучения данной дисциплины необходимы «входные» знания, умения, полученные в процессе обучения по программам специалитета или бакалавриата – магистратуры, а также при изучении дисциплины «Современная органическая химия») в аспирантуре и готовность обучающегося, к восприятию знаний и навыков, необходимых при освоении данной дисциплины и приобретенных в результате освоения предшествующих дисциплин. Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее для выполнения и защиты диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук.

## 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине – знания, умения, навыки и (или) опыт деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций и обеспечивающие достижение планируемых результатов освоения программы аспирантуры, и критерии их оценивания

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

- **Профессиональные компетенции:** способностью применять современные представления о моделировании химических процессов и систем для решения фундаментальных и прикладных задач органической химии (ПК-2).

Код компетенции	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения		
		Пороговый уровень	Продвинутый уровень	Высокий уровень
ПК - 2	<b>знать:</b> - основные направления применения компьютерных технологий в химических исследованиях и промышленной химии	- основные направления применения компьютерных технологий в химических исследованиях	- основные направления применения компьютерных технологий в химических исследованиях и промышленной химии	- основные направления применения и перспективы развития компьютерных технологий в химических исследованиях и промышленной химии
	<b>уметь:</b> - грамотно и эффективно использовать прикладные программные продукты и информационные ресурсы при решении	- использовать прикладные программные продукты и информационные ресурсы при	- грамотно и эффективно использовать прикладные программные продукты и	- грамотно и эффективно использовать прикладные программные продукты и

	экспериментальных и теоретических проблем в области химии.	решении химических задач	информационные ресурсы при решении экспериментальных и теоретических проблем в области химии.	информационные ресурсы при решении экспериментальных и теоретических проблем в области химии, модифицировать алгоритмы применения..
	<b>владеть:</b> - навыками применения компьютерных технологий в научных исследованиях, образовании, производственных секторах реальной экономики химического профиля.	- навыками применения компьютерных технологий в научных исследованиях, образовании	- навыками применения компьютерных технологий в научных исследованиях, образовании, производственных секторах реальной экономики химического профиля.	- навыками применения и развития компьютерных технологий в научных исследованиях, образовании, производственных секторах реальной экономики химического профиля.

#### 4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 акад.часов  
Дисциплина изучается в течение 2-го семестра.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий и их трудоемкость (в академических часах)					Формы текущего контроля успеваемости	
			лекции	практические	лабораторные	консультации	самостоятельная работа	Форма промежуточной аттестации (по семестрам)	
1.	<b>Тема 1.</b> Предмет компьютерной химии	2	1			1	16	Реферат	
2.	<b>Тема 2.</b> Химические редакторы и базы данных	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы	
3	<b>Тема 3.</b> Математические методы компьютерного	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной	

	моделирования свойств вещества и химических превращений							работы
4	<b>Тема 4.</b> Формально-логические подходы к конструированию органических молекул и поиску новых органических реакций	2	1			1	16	Задание в рамках самостоятельной работы
5	<b>Тема 5.</b> Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры.	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
6	<b>Тема 6.</b> Компьютерные технологии в обмене научной информацией	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
								Зачет
	<b>Всего</b>		<b>6</b>			<b>2</b>	<b>100</b>	

### Содержание разделов дисциплины:

**Тема 1.** Предмет компьютерной химии. История ее возникновения. Современный этап развития. Когда и как должна использоваться вычислительная химия.

**Тема 2.** Химические редакторы и базы данных. Современные основные программные продукты.

**Тема 3.** Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений. Изучение свойств молекул при помощи методов компьютерной химии.

**Тема 4.** Формально-логические подходы к конструированию органических молекул и поиску новых органических реакций. Оптимизация схем синтеза органических веществ. Комбинаторная химия. Корреляция структуры природных соединений с их физико-химическими свойствами и биологической активностью. Поиск новых биологически активных веществ. Компьютерная биохимия.

**Тема 5.** Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.

**Тема 6.** Компьютерные технологии в обмене научной информацией. Основные интернет-ресурсы химического профиля, повышение эффективности доступа к ним. Поиск, хранение и обработка химической информации. Особенности представления химической информации.

**5. Образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В преподавании курса используются активные и интерактивные технологии проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой.

**Академические лекции** (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов. Лекции имеют мультимедийное сопровождение

**Самостоятельная работа**– изучение студентами теоретического материала, подготовка к лекциям и отработка навыков по решению ситуационных задач.

## **6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень лицензионного программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости).**

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- мультимедийное сопровождение лекций;
- программы Microsoft Office;
- для поиска учебной литературы библиотеки ЯрГУ – Автоматизированная библиотечная информационная система "БУКИ-NEXT" (АБИС "Буки-Next").

## **7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимых для освоения дисциплины**

### **а) основная литература**

Бутырская Е.В. Компьютерная химия [Электронный ресурс] : основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. — Электрон. текстовые данные. — М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. — 224 с. — 978-5-91359-095-4. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/20870.html>

Орлов В.Ю., Русаков А.И., Тихонов С.В. Компьютерные технологии в образовательной и научной деятельности. – Ярославль, : ЯрГУ, 2005. - 124 с.

### **б) дополнительная литература**

Белашенко Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии [Электронный ресурс] : лабораторный практикум / Д.К. Белашенко. — Электрон. текстовые данные. — М. : Издательский Дом МИСиС, 2012. — 109 с. — 2227-8397. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/56068.html>

### **в) ресурсы сети «Интернет»**

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)).
2. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://www.edu.ru> (раздел Учебно-методическая библиотека) или по прямой ссылке <http://window.edu.ru/library>).
3. Американское химическое общество (<http://www.acs.org/>).
4. Королевское химическое общество (<http://www.rsc.org/>).
5. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.ru/>).

## **8. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Мультимедийное оборудование и раздаточный материал (формулы, стандартные показатели и т.д., необходимые для решения ситуационных задач)

Автор:

Профессор кафедры  
органической и биологической химии, д.х.н.  
*(должность, ученая степень)*

  
\_\_\_\_\_  
*(подпись)* В.Ю. Орлов  
*(Фамилия И.О.)*

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины  
«Компьютерная химия»**

**Оценочные средства  
для проведения текущей и/или промежуточной аттестации аспирантов  
по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания или иные материалы,  
необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности,  
характеризующих этапы формирования компетенций**

**1.1 Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации**

**Задания для самостоятельной работы.**

**Задание № 1**

Подготовить презентацию доклада с использованием химических редакторов

**Задание № 2**

Провести расчет заданной структуры методами квантовой химии.

**Задание № 3**

Найти связь между параметрами структуры ряда соединений и их свойствами.

**Задание № 4**

Провести статистическую обработку данных количественного анализа.

**Задание № 5**

Поиск заданной информации.

**Темы рефератов**

1. Модели, гипотезы, приближения и реальность в химии.
2. Обзор существующих в компьютерной химии методов.
3. Методы, генетически связанные с квантовой химией.
4. Поиск структуры переходных состояний методами компьютерной химии.
5. Расчеты кинетики химических реакций.
6. Изучение свойств возбужденных состояний методами современной компьютерной химии.
7. Определение свойств молекул и их реакций для химических, биологических, медицинских и т.д. исследований.
8. Информационные потоки в химии и их неоднородность

**Список вопросов к зачету:**

1. Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации.
2. Принципы организации баз научных и справочных данных.
3. Компьютерное обеспечение аналитического оборудования.
4. Статистическая обработка результатов измерений.
5. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества.
6. Квантово-химическое моделирование.
7. Химические редакторы.
8. Отображение результатов исследований.
9. QSAR.
10. Программное обеспечение к конструированию органических молекул.
11. Компьютерные технологии в обмене научной информацией.
12. Химические ресурсы Интернет.

### **Методические указания для аспирантов по освоению дисциплины**

Приступая к изучению дисциплины, необходимо в первую очередь ознакомиться с содержанием РПД. Лекции имеют целью дать систематизированные основы научных знаний об оценке риска здоровью, кроме этого на лекциях разбираются типовые ситуационные задачи по темам.

#### 1. Текущий контроль успеваемости.

При изучении и проработке теоретического материала необходимо:

- повторить законспектированный на лекционном занятии материал;
- пользуясь лекционным материалом и основной литературой, рекомендованной для освоения дисциплины, выполнить практические задания, которые выдаются преподавателем в конце лекции. Задания подготавливаются самостоятельно, оформляются в письменном (печатном) виде и сдаются преподавателю на проверку в течении недели с момента его получения.

#### 2. Промежуточная аттестация.

Зачетное мероприятие будет складываться из ответа на теоретический вопрос из перечня, приведенного в Приложении №1 пункт 1.1 " Список вопросов к зачету

### **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов по дисциплине**

Для самостоятельной работы аспирант может использовать конспекты лекций, основную и дополнительную учебную литературу, приведенную в пункте 7 данной РПД, а также ресурсы сети "Интернет".

#### **Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», рекомендованных к использованию при освоении дисциплины**

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ ([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)).
2. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://www.edu.ru> (раздел Учебно-методическая библиотека) или по прямой ссылке <http://window.edu.ru/library>).
3. Американское химическое общество (<http://www.acs.org/>).
4. Королевское химическое общество (<http://www.rsc.org/>).
5. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.ru/>).