Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ганеев Винер Валиахметович
Должность: Директор
Дата подписания: 13.11.2026 15:43:51
Уникальный программный ключ:
fceab25d7092f3bff743e8ad3f8d57fddc1f5e66

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»

Бирский филиал

ФАКУЛЬТЕТ БИОЛОГИИ И ХИМИИ

УТВЕРЖДАЮ:
Декан
подписано ЭЦП Шмелев Н.А.
(подпись, инициалы, фамилия)

«26» 02 2026 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Компьютерная химия
(наименование дисциплины)

ОПОП ВО программа магистратуры
04.04.01 Химия
шифр и наименование направления подготовки (специальности)

направленность (профиль, специализация)

Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность
наименование направленности (профиля, специализации)

форма обучения
очная
(очная, очно-заочная, заочная)

Бирск 2026 г.

Рабочая программа составлена на основании учебного плана основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 Химия профиль Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность, одобренного ученым советом Бирского филиала Уфимского университета науки и технологий (протокол №7 от 27.02.206 г.) и утвержденного директором Бирского филиала 27.02.206.

Зав.кафедрой кафедры биологии, экологии и химии *(наименование кафедры разработчика программы)*	*подписано ЭЦП*	Онина С.А.
Разработчик программы	*подписано ЭЦП*	Газетдинов Р.Р.
Руководитель образовательной программы	*подписано ЭЦП*	Онина С.А.

1. Цель дисциплины. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

1.1. Цель дисциплины

Цель изучения дисциплины: освоение системы базовых знаний, отражающих вклад информатики в формирование современной научной картины мира, роль информационных процессов в обществе, биологических и технических системах. получение правильного и всестороннего представления о возможностях использования компьютерных технологий в химической науке и образовании.

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

Таблица 1. – Результаты обучения по дисциплине

Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)		Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной
код компетенции	наименование компетенции	
ОПК-1	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	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения, синтеза и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии
		ОПК-1.2. Проводит комплексные экспериментальные исследования с использованием современных приборов физико-химического анализа (например, ЯМР, ИК-спектроскопия, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ).
		ОПК-1.3. Применяет методы расчетно-теоретического моделирования и специализированного программного обеспечение для прогнозирования свойств веществ и интерпретации результатов.
ОПК-3	Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.1. Грамотно подбирает вычислительные методы и способен адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности
		ОПК-3.2. Использует вычислительные методы и умеет адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности
		ОПК-3.3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности

2. Структура и трудоемкость дисциплины

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 4 зачетные единицы (з.е.), 144 академических часов.

Таблица 2 – Объем дисциплины

Виды учебной работы	Всего, часов	Количество часов в семестре
Общая трудоемкость дисциплины	144	1 семестр - 144
Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий (всего)	20	1 семестр - 20
в том числе:		
лекции	6	1 семестр - 6
лабораторные занятия	0	
практические занятия	14	1 семестр - 14
Другие виды работ в соответствии с УП:		
контрольная работа	0	
консультации	0	
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	124	1 семестр - 124
Из них:		
контроль	0	
ФКР:		
зачет	0.2	1 семестр - 1
зачет с оценкой	0	
курсовая работа (проект)	0	
экзамен	0	

3 Содержание дисциплины

Таблица 3 – Содержание дисциплины

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Виды деятельности				Форма текущего контроля успеваемости
		Лек, час.	П, час.	Зч, час.	СРС, час.	
1 курс / 1 семестр						
1	Теоретические основы компьютерных технологий.					
1.1	Теоретические основы компьютерных технологий Аппаратное и программное обеспечение компьютерных технологий. Современное состояние и развитие ЭВМ и связанных с ними технологий.	1	2		23.8	Практические работы, Тестирование
1.2	Математические методы компьютерного моделирования	1	4		28	Тестирование, Практические работы

	Компьютерное моделирование в химии. Ознакомление с пакетом HyperChem 8.0.8.					
1.3	Методы и средства обработки экспериментальных данных Методы и средства обработки экспериментальных данных в химии. Пакет ACDLabs.	2	4		36	Тестирование, Практические работы
1.4	Визуализация экспериментальных данных Программы визуализации данных в химии. Пакт BioRadLabs.	2	4		36	Практические работы, Тестирование
2	Зачет			1	0.2	
Итого по 1 курсу 1 семестру		6	14	1	124	
Итого по дисциплине		6	14	1	124	

Таблица 4 – Практические (семинарские) занятия

№ п/п	Наименование семинарских и практических работ	Объем, час.
1 курс / 1 семестр		
1.	Аппаратное и программное обеспечение компьютерных технологий	2
2.	Компьютерное моделирование в химии.	2
3.	Ознакомление с пакетом HyperChem 8.0.8.	2
4.	Методы и средства обработки экспериментальных данных в химии	2
5.	Пакет ACDLabs.	2
6.	Программы визуализации данных в химии.	2
7.	Пакт BioRadLabs.	2

4. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины. Баллы, выставляемые за конкретные виды деятельности представлены ниже.

Контрольные задания для проведения текущего контроля успеваемости

Тестовые задания

Описание тестовых заданий: тестовые задания включают тесты закрытого типа (с одним правильным ответом), тесты на установлении последовательности и на установление соответствия. Оценка за выполнение тестовых заданий выставляется на основании процента заданий, выполненных студентами в процессе прохождения промежуточного и рубежного контроля знаний

70. В текстовом процессоре MS Word можно создавать списки следующих типов:
-: основной
-: буквенный
+: маркированный
+: нумерованный
+: многоуровневый

71. К какому типу программ относится программа MS Excel?
+: электронная таблица
-: текстовый процессор
-: графический редактор
-: табличный редактор

72. Какие типы данных могут содержать электронные таблицы MS Excel
-: числовые, текстовые
-: текстовые, формулы
-: числовые, формулы
+: числовые, текстовые, формулы

143. В программе HyperChem для начала расчетов методом молекулярной механики в диалоговом окне какую потенциальную функцию для расчетов необходимо выбрать?
-: BIO+
-: Setup
-: OPLS
+: Force field

144. В программе HyperChem метод MM+ разрабатывался для …
-: неорганических молекул
-: нуклеиновых кислот
-: биологических макромолекул
+: органических молекул

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания выполнения тестовых заданий

Описание методики оценивания выполнения тестовых заданий: оценка за выполнение тестовых заданий ставится на основании подсчета процента правильно выполненных тестовых заданий.
Критерии оценки (в баллах*)*:
- **9-10** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 81 – 100 %;
- **7-8** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 61 – 80 %;
- **4-6** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 41 – 60 %;
- **до 4** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 40 %;

Практические работы

Практические работы, являются важным источником познания нового материала, способствуют формированию и совершенствованию практических умений и навыков обучающихся.
Лабораторная работа. Создание полипептидов.
Построение цепи аминокислот
До сих пор Вы учились строить отдельные молекулы и отображать их, читая координаты из файла HIN. В этом разделе изложены принципы построения полипептидов посредством последовательного выбора остатков аминокислот из библиотеки *HyperChem*.
Чтобы открыть диалоговое меню библиотеки аминокислот:
Выберите меню *Databases* (*База Данных*) пункт *Amino Acids* (*Аминокислоты*).
Это диалоговое меню является устойчивым и остается открытым все время, пока Вы строите полипептид.
Последовательно выбирая остатки, Вы строите вторичную структуру полипептида. Но для этого нужно в диалоговом окне отметить, что должна представлять из себя эта структура: альфа-спираль (*Alphe helix*), бетта-лист (складчатость) (*Beta sheet*) или другие варианты. Автоматически устанавливаются как *phi* так и угол *psi*. Угол омеги (*Omega*) можно изменить но обычно это 180 º для транс-пептидной связи. Начинайте построение с N-конца полипептидной цепи.
Чтобы построить цепь:
L-щелчком последовательно выбирайте аминокислоты начиная с N-концевого остатка. *HyperChem* строит цепь, располагая аминокислоты под соответствующими углами относительно друг друга
Создание цвиттер-иона
В построенной Вами полипептидной цепи N-конец содержит HN- , а C-конец -CO группу.
Создание цвиттериона модифицирует N- и C- концевые остатки аминокислот.
Чтобы создать цвиттерион в меню База данных виберите пункт *Цвиттерион* (*Zwitterion*). HyperChem добавит атом кислорода на C-конец полипептида (получится COO^-) и два протона к N-концу (до NH_3).

Мутагенез
Сайт-специфический мутагенез играет важную роль в белковой инженерии. Замена конкретной аминокислоты на критическом месте может изменить структуру и свойства белка, а следовательно, функцию.
Чтобы заменить остаток:
Сначала выберите аминокислоту, которую нужно заменить. Для этого в меню *Дисплей* в пункте *Этикетки* (*Labels*) отметьте *Name+Seq* как опции для маркирования остатков и нажмите OK.
Можно также в меню В*ыбор* (*Select*) отметить *Остатки* (*Residues*).
После чего измените форму курсора на *Select* и L-щелчком кнопки мыши выберите нужную аминокислоту.
В меню *База данных* становиться активным пункт *Мутировать* (*Mutate*), который ранее был неактивен

В диалоговом меню *Mutate* выберите из списка аминокислоту, на которую будет заменен выделенный остаток и нажмите OK. Происходит замена
Сохраните полученную структуру.
Упражнения
1. Постройте следующую полипептидную цепь в бетте-конформации:
2. Создайте нуклеиновую кислоту, использующую Nucleic Acids в меню Баз Данных.

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания выполнения практических работ

Описание методики оценивания выполнения практических работ: оценка за выполнение тестовых заданий ставится на основании знания теоретического материала по теме практической работы, умений и навыков применения знаний на практике, работы с оборудованием, анализировать результаты практической работы.
Критерии оценки (в баллах*):*
- **5** баллов выставляется студенту, если демонстрируются знания темы, цели и задач практической работы, хода работы, применяемых методик исследования; демонстрируется полное знание теоретического материала по теме практической работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются умения и навыки работы с оборудованием, применения знания на практике, анализа результатов практической работы и формулирование выводов, владение навыками прикладной деятельности;
- **4** балла выставляется студенту, если демонстрируются знания темы, цели и задач практической работы, хода работы, имеются пробелы в знании применяемых методик исследования; демонстрируется неполное знание фактического материала по теме практической работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются некоторые недостатки умения работать с оборудованием, применять знания на практике, недостатки владения навыками прикладной деятельности и способности анализировать результаты практической работы, формулировать выводы, прослеживать причинно-следственные связи;
- **3** балла выставляется студенту, если демонстрируются неполные знания цели и задач практической работы, хода работы, применяемых методик исследования; демонстрируется неполное, несистемное знание теоретического материала по теме практической работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются заметные недостатки в умении работать с оборудованием, применять знания на практике, недостаточно владеет навыками прикладной деятельности, способностью анализировать результаты практической работы и формулировать выводы, прослеживать причинно-следственные связи;
- **0-2** балла выставляется студенту, если демонстрируются полное или почти полное отсутствие знания цели и задач практической работы, хода работы, применяемых методик исследования; демонстрируется полное или почти полное отсутствие знания теоретического материала по теме практической работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются значительные недостатки умения работать с оборудованием, применять знания на практике, владения навыками прикладной деятельности, способности анализировать результаты практической работы и формулировать выводы, прослеживать причинно-следственные связи.

Зачет

Зачет является оценочным средством для всех этапов освоения компетенций.

Примерные вопросы к зачету, 1 курс / 1 семестр

1. Состояние развития современной компьютерной техники и телекоммуникаций.
2. Общие сведения о компьютерах, классификация и применение.
3. Архитектура современного персонального компьютера, устройство и основные компоненты.
4. Основные правила работы с персональным компьютером, требования безопасности и соблюдение основ охраны здоровья.

5. Информационные системы, структура и классификация информационных систем.
6. Информационные технологии, их структура и классификация.
7. Безопасность информационных систем и технологий.
8. Информационные технологии в науке и образовании.
9. Технологии искусственного интеллекта.
10. Сети и сетевые информационные технологии.
11. Аппаратное обеспечение компьютерных технологий.
12. Мультимедийное обеспечение информационных технологий.
13. Глобальная информационная сеть Интернет.
14. Использование компьютера в современной химической лаборатории.
15. Программное обеспечение компьютерных технологий.
16. Системное программное обеспечение современного компьютера.
17. Прикладное программное обеспечение современного компьютера.
18. Текстовые редакторы и процессоры. Классификация и возможности.
19. Графические редакторы, общая информация.
20. Современные веб-браузеры Internet Explorer, Google Chrome и т.д.
21. Современные операционные системы. MS Windows, основные особенности.
22. Программные средства для квантово-химических расчетов.
23. Роль визуализации в научной работе. Комплект программ, выполняющих эту роль.
24. Создание и представление химических формул в 2D и 3D.
25. Программа HyperChem, общая информация, возможности и использование.
26. Программа ChemWind, общая информация, возможности и использование.
27. Пакет программ ACDLabs, общая информация, возможности и использование.
28. Использование пакета ACDLabs при обработке ЯМР-спектров.
29. Пакет MS Office, общая информация, возможности.
30. Программа MS Word, общие сведения, особенности редактирования текстовой информации.
31. Программа MS Excel, общие сведения, возможности выполнения научных расчетов, редактирование табличной информации.
32. Программа MS PoverPoint, общие сведения, создание и демонстрация презентаций.
33. Представление результатов в виде статей, презентаций, web-публикаций. Средства для создания презентаций и web-публикаций. Использование форматов PDF для представления научных статей.
34. Поиск химической информации в Интернете. Научные публикации и базы данных.

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания зачета

Зачет выставляется по рейтингу, в зависимости от эффективности работы в процессе изучения дисциплины, что определяется количеством набранных баллов за все виды заданий текущего и рубежного контроля
зачтено – от 60 до 110 баллов
не зачтено – от 0 до 59 баллов.

Задания для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме:

1 семестр - зачет.

Проверяемыми на промежуточной аттестации элементами содержания являются темы дисциплины.

Для проверки *знаний* используются вопросы и задания в различных формах.

Умения, навыки (или опыт деятельности) и компетенции проверяются с помощью компетентностно-ориентированных задач (ситуационных, производственных или кейсового характера) и различного вида конструкторов.

Все задачи являются многоходовыми. Некоторые задачи, проверяющие уровень сформированности компетенций, являются многовариантными. Часть умений, навыков и компетенций прямо не отражена в формулировках задач, но они могут быть проявлены обучающимися при их решении.

В каждый вариант включаются задания по каждому проверяемому элементу содержания во всех перечисленных выше формах и разного уровня сложности. Такой формат позволяет объективно определить качество освоения обучающимися основных элементов содержания дисциплины и уровень сформированности компетенций.

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине при использовании модульно-рейтинговой системы

Критериями оценивания при модульно-рейтинговой системе являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины:

для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10.

Шкалы оценивания:

для зачета:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),

не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов.

Рейтинг-план дисциплины

Таблица перевода баллов текущего контроля в баллы рейтинга

	5	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**	**5**
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	5	3	2	2	1	1	1	1	1	1
2		5	4	3	2	2	2	2	2	1
3			5	4	3	3	3	2	2	2
4				5	4	4	3	3	3	2
5					5	5	4	4	3	3
6						5	5	4	4	3
7							5	5	4	4
8								5	5	4
9									5	5
10										5

Рейтинг-план дисциплины представлен в Приложении 1.

5. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

5.1. Основная учебная литература

1. Информационные технологии в науке и образовании : учеб. пособ. для магистров, обуч. по спец.552800 "Информатика и вычислит. техника", 540600 "Педагогика" / Е. Л. Федотова , А. А. Федотов .— М. : Форум: ИНФРА-М, 2010 .— 334 с.

5.2. Дополнительная учебная литература

1. Информационные технологии в науке и образовании : учеб. пособ. для магистров, обуч. по спец.552800 "Информатика и вычислит. техника", 540600 "Педагогика" / Е. Л. Федотова , А. А. Федотов .— М. : Форум: ИНФРА-М, 2010 .— 334 с.

5.3. Другие учебно-методические материалы

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

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://elibrary.ru/.
2. Электронная библиотечная система «Лань» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/.
3. Университетская библиотека онлайн biblioclub.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/.
4. Электронная библиотека УУНиТ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://elib.bashedu.ru/.
5. Российская государственная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://www.rsl.ru/.
6. Национальная электронная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://xn--90ax2c.xn--p1ai/viewers/.
7. Национальная платформа открытого образования npoed.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://npoed.ru/.
8. Электронное образование Республики Башкортостан [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://edu.bashkortostan.ru/.
9. Информационно-правовой портал Гарант.ру [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.garant.ru/.

Программное обеспечение

1. LIBREOFFICE - Договор №0301400003023000002 от 14.03.2023 (бессрочный)
2. Операционная система Astra Linux - Договор 0301400003023000002 от 14 марта 2023 бессрочно

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

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов,	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения

лабораторий		
Аудитория 11(БФ)	Лекционная, Семинарская, Для консультаций, Для контроля и аттестации	Доска, ибп, коммутатор, компьютер, мебель (столы для коворкинг зоны). Программное обеспечение 1. LIBREOFFICE
Аудитория 12а(БФ)	Для хранения оборудования	Комплект визуализации на базе canon, нетбук.
Аудитория 30(БФ)	Для самостоятельной работы	Компьютер, мебель, учебно-методические материалы. Программное обеспечение 1. LIBREOFFICE 2. Операционная система Astra Linux
Аудитория 34(БФ)	Для консультаций	Компьютер, монитор. Программное обеспечение 1. LIBREOFFICE 2. Операционная система Astra Linux