

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Косенок Сергей Михайлович
Должность: ректор
Дата подписания: 02.07.2026 14:40:01
Уникальный программный ключ:
e3a68f3eaa1e62674b54f4998099d3d6bfdcf836

Ханты-Мансийского автономного округа-Югры
Сургутский государственный университет"

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по УМР

11 июня 2026 г., протокол УМС №5

МОДУЛЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Компьютерные технологии в химии

рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой

Химии

Учебный план

b040301-Инфохим-26-2.plx

04.03.01 ХИМИЯ

Направленность (профиль): Инфохимия

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

2 ЗЕТ

Часов по учебному плану

72

Виды контроля в семестрах:

в том числе:

зачет 3

контрольная работа 3

аудиторные занятия

32

самостоятельная работа

36

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	3 (2.1)		Итого	
Недель	17 2/6			
Вид занятий	уп	рп	уп	рп
Лекции	16	16	16	16
Лабораторные	16	16	16	16
Контроль самостоятельной работы	4	4	4	4
Итого ауд.	32	32	32	32
Контактная работа	36	36	36	36
Сам. работа	36	36	36	36
Итого	72	72	72	72

Программу составил(и):

Канд. физ.-мат. наук, Доцент, Деева А.А.

Рабочая программа дисциплины

Компьютерные технологии в химии

разработана в соответствии с ФГОС:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия (приказ Минобрнауки России от 17.07.2017 г. № 671)

составлена на основании учебного плана:

04.03.01 ХИМИЯ

Направленность (профиль): Инфохимия

утвержденного учебно-методическим советом вуза от 11.06.2026 протокол № 5.

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Химии

Зав. кафедрой канд.,хим,наук Таныкова Наталья Геннадьевна

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1	Формирование у студентов системных компетенций в области применения современных компьютерных технологий и вычислительных методов для решения фундаментальных и прикладных задач химии, включая обработку, визуализацию и моделирование химических процессов и систем
1.2	Задачи дисциплины:
1.3	Формирование знаний о функциональных возможностях современных химических редакторов, электронных баз данных и принципах эффективного поиска химической информации.
1.4	Формирование навыков применения базовых методов молекулярного моделирования и компьютерной химии с применением профильного ПО
1.5	Формирование навыков визуализации, статистической обработки и анализа химических данных с помощью современных инструментов и специализированных пакетов
1.6	Формирование знаний о базовых концепциях машинного обучения (классификация, регрессия) в химии и о возможностях онлайн-сервисов для прогнозирования свойств веществ.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ООП:	Б1.О.07
2.1 Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Прикладная статистика в химии
2.1.2	Информатика
2.1.3	Введение в профессиональную деятельность
2.1.4	Неорганическая химия
2.1.5	Математика и основы статистики для химиков
2.1.6	Цифровая грамотность
2.2 Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Химические основы биологических процессов
2.2.2	DataScience в химии
2.2.3	Применение информационно-коммуникационных технологий в науке и образовании
2.2.4	Математическое моделирование химических процессов

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**ОПК-5.2: Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности****В результате освоения дисциплины обучающийся должен**

3.1 Знать:	
3.1.1	основы системного подхода для решения поставленных задач
3.2 Уметь:	
3.2.1	анализировать задачу, выделяя ее базовые составляющие

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Компетенции	Литература	Примечание
	Раздел 1. Химическая информатика и работа с химическими базами данных					

1.1	Роль компьютерных технологий в современной химии. Химические базы данных, форматы представления химической информации /Лек/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
1.2	Поиск и анализ химических соединений в базах данных, работа со структурными запросами, анализ физико-химических свойств молекул /Лаб/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
1.3	Изучение химических баз данных и методов поиска химической информации /Ср/	3	6	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 2. Молекулярное моделирование и оптимизация структуры соединений					
2.1	Теоретические основы молекулярного моделирования. Методы оптимизации геометрии, силовые поля и квантово-химические подходы /Лек/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
2.2	Построение и оптимизация молекулярных структур с использованием различных силовых полей /Лаб/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
2.3	Анализ методов оптимизации молекулярных структур и факторов, влияющих на результаты расчётов /Ср/	3	6	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 3. Конформационный анализ и молекулярная динамика					
3.1	Конформационный анализ. Теория и области применения молекулярной динамики /Лек/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
3.2	Визуализация молекулярных систем. Настройка, проведение и анализ молекулярно-динамических расчётов для различных химических объектов /Лаб/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
3.3	Изучение принципов молекулярно-динамического моделирования /Ср/	3	6	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
3.4	Применение молекулярной динамики для исследования свойств веществ /Лек/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	

3.5	Моделирование низкомолекулярных соединений в растворителе и анализ результатов /Лаб/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
3.6	Изучение методов анализа траекторий молекулярной динамики, структурных характеристик молекулярных систем, и применение моделирования в химических исследованиях /Ср/	3	6	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 4. Компьютерный поиск биологически активных соединений					
4.1	Фармакофорное моделирование, молекулярный докинг и виртуальный скрининг /Лек/	3	4	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
4.2	Построение фармакофорных моделей, поиск лигандов, выполнение молекулярного докинга и анализ комплексов белок–лиганд /Лаб/	3	4	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
4.3	Анализ современных методов компьютерного поиска и оценки перспективных химических соединений /Ср/	3	6	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 5. Искусственный интеллект и машинное обучение в химии					
5.1	Статистические методы анализа химических данных. Машинное обучение для прогнозирования свойств химических систем /Лек/	3	4	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.2	Обработка и анализ химических данных с использованием регрессионного анализа и инструментов Python /Лаб/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.3	Построение предиктивных моделей на основе методов машинного обучения и оценка качества прогнозирования /Лаб/	3	2	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.4	Изучение методов статистического анализа и предобработки данных. Анализ возможностей методов машинного обучения для решения химических задач /Ср/	3	6	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
6	Зачет /Зачет/	3	36	ОПК-5.2	Л1.1 Л1.5 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л3.3 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	Зачет

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА**5.1. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации**

Представлены отдельным документом

5.2. Оценочные материалы для диагностического тестирования

Представлены отдельным документом

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**6.1. Рекомендуемая литература****6.1.1. Основная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
--	---------------------	----------	-------------------	----------

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л1.1	Мендель А. В.	Модели принятия решений: Учебное пособие	Москва: ЮНИТИ-ДАНА, 2012, Электронный ресурс	1
Л1.2	Рябошাপко Б.В.	Модели принятия решений при проектировании систем сбора данных: Учебное пособие	Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета (ЮФУ), 2019, Электронный ресурс	1
Л1.3	Малахова Ю. Н., Григорьев Т. Е., Чвалун С. Н.	Информационные технологии в химии полимеров: учебно-методическое пособие	Москва: РТУ МИРЭА, 2022, Электронный ресурс	1
Л1.4	Евстафьев В.А., Тюков М.А.	Искусственный интеллект и нейросети: практика применения в рекламе: Учебное пособие	Москва: Издательско-торговая корпорация "Дашков и К", 2023, Электронный ресурс	1
Л1.5	Громов Н. В., Таран О. П.	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа. Сборник задач с основами теории и примерами решений: Учебное пособие	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет, 2018, Электронный ресурс	1
6.1.2. Дополнительная литература				
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л2.1	Тамбовский И. В.	Информационные технологии в химии: методические указания к выполнению самостоятельной работы	Кострома: КГУ им. Н.А. Некрасова, 2020, Электронный ресурс	1
Л2.2	Цукалос М.	Golang для профи: работа с сетью, многопоточность, структуры данных и машинное обучение с Go: Практическое пособие	Санкт-Петербург: Питер, 2021, Электронный ресурс	1
6.1.3. Методические разработки				
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л3.1	Туров Ю. П., Петрова Ю. Ю., Ветрова О. Ю.	Аналитическая химия: методические указания	Сургут: Издательский центр СурГУ, 2012, Электронный ресурс	1

ЛЗ.2	Сизова Л. С., Гуськова В. П.	Аналитическая химия. Титриметрический и гравиметрический методы анализа: Учебное пособие	Кемерово: Кемеровский технологический институт пищевой промышленности, 2006, Электронный ресурс	1
------	------------------------------	--	---	---

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
ЛЗ.3	Буртаев Ю. Ф., Колесник В. Н., Чеховская А. В., Чеховский А. В.	Статистические методы системного анализа: Учеб. пособие	Сургут: Изд-во СурГУ, 2001	44
6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"				
Э1	Scopus (https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic#basic)			
Э2	РИНЦ (https://elibrary.ru/defaultx.asp?)			
Э3	PubMed Central (http://publicaccess.nih.gov/index.htm)			
Э4	Система SourceForge (http://sourceforge.net/)			
6.3.1 Перечень программного обеспечения				
6.3.1.1	Операционная система Microsoft Windows, пакет прикладных программ Microsoft Office			
6.3.2 Перечень информационных справочных систем				
6.3.2.1	Национальная электронная библиотека - нэб.рф;			
6.3.2.2	Электронные книги Springer Nature (Science, Technology and Medicine Collections) - https://link.springer.com ;			
6.3.2.3	Гарант-информационно-правовой портал - http://www.garant.ru ;			
6.3.2.4	КонсультантПлюс - надежная правовая поддержка - http://www.consultant.ru			

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	
7.1	Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа (практических занятий), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащены: типовой учебной мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.