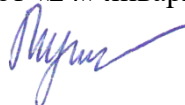


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол № 5 от «24» января 2022 г.
Зав. кафедрой

 / А.Г. Мустафин

Согласовано:
Председатель УМК химического
факультета

 / Г.Г. Гарифуллина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Цифровые технологии в химии

Часть, формируемая участниками образовательных отношений

программа магистратуры



Направление подготовки (специальность)

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки

Новые материалы в нефтехимии и других отраслях

Квалификация
магистр

Разработчик (составитель) профессор, д.х.н., доцент	 / Сабиров Д.Ш.
Доцент, к.х.н., доцент	 _____ / Насретдинова Р.Н.

Для приёма: 2022 г.

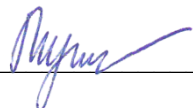
Уфа 2022 г.

Составитель:

доц., д.х.н., проф. кафедры физической химии и химической экологии Сабилов Д.Ш.,
доцент, к.х.н., доцент кафедры физической химии и химической экологии Насретдинова Р.Н.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 5 от «24» января 2022 г.

Заведующий кафедрой

 / Мустафин А.Г.

Список документов и материалов

1.	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	4
2.	Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	7
3.	Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	7
4.	Фонд оценочных средств по дисциплине	8
4.1.	Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине	8
4.2.	Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине	23
5.	Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	28
5.1.	Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	28
5.2.	Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы	28
6.	Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	29

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.1. Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля	Знать: основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности Уметь: проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач Владеть: навыками работы с научными и образовательными порталами
	ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	Знать: основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач Владеть: базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу
		ОПК-3.2. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	Уметь: применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Цифровые технологии в химии» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений.

Дисциплина изучается на 2 курсе в 3 семестре.

Цели изучения дисциплины:

- формирование у магистров представлений о видах и методах современных цифровых технологий, их применении в химии и химической промышленности;
- формирование общих представлений о способах применения современных цифровых технологий для решения фундаментальных, прикладных и поисковых научных задач в области химии и химической технологии.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин: физическая химия, коллоидная химия, химия неорганических, органических и высокомолекулярных соединений, химическая технология.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции **ОПК-3**. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
ОПК-3.1. Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля	Знать: основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности	Знает названия нескольких основных российских научных и образовательных порталов по химии	Знает структуру и содержание основных российских и международных научных и образовательных порталов по химии, правила составления поисковых запросов
	Уметь: проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач	Испытывает затруднения в последовательности операций и составлении поискового запроса	Умеет находить общую информацию для решения профессиональных задач
	Владеть: навыками работы с научными и образовательными порталами	Затрудняется в поиске профессиональной информации в сети Интернет	Владеет навыками получения общей научно-технической информации в сети Интернет
ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	Знать: основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач	Знает устройство компьютера, назначение его основных рабочих узлов	Знает основные правила и приемы составления библиографических баз данных с использованием стандартного программного обеспечения
	Владеть: базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу	Способен использовать стандартное программное обеспечение для обработки результатов исследований и подготовки презентаций при непосредственной помощи сотрудника более высокой квалификации	Способен в сжатые сроки освоить новое программное обеспечение под руководством специалиста более высокой квалификации, способен подготовить тезисы доклада и презентацию по заданной теме при наличии шаблона
ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента,	Уметь: применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов	Умеет использовать отдельные функции наиболее распространенных программных продуктов при обработке экспериментальных данных и подготовке научных публика-	Умеет использовать несколько программных продуктов для обработки экспериментальных данных и подготовки научных публикаций и докладов

моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием		ций и докладов	
--	--	----------------	--

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-3.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля	Знать: основные источники информации для решения задач профессиональной сферы деятельности Уметь: проводить первичный поиск информации для решения профессиональных задач Владеть: навыками работы с научными и образовательными порталами	Устный опрос
ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	Знать: основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач Владеть: базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов исследований и представления их научному сообществу	Устный опрос
ОПК-3.2. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	Уметь: применять стандартное программное обеспечение при решении химических и материаловедческих задач, при подготовке научных публикаций и докладов	Устный опрос

Примерные вопросы для зачета:

1. Физические, математические и цифровые модели в химии.
2. Математический аппарат описания химических соединений и химических процессов.
3. Алгоритмический аппарат описания химических систем.
4. Роль квантовой химии и молекулярной динамики в визуализации химических соединений и процессов.
5. Иерархические уровни «химической реальности» и особенности их цифрового описания.
6. Основные понятия цифровых технологий (цифровые двойники, базы данных, алгоритмы обработки данных, релевантность цифровых моделей) применительно к химии.
7. Программные продукты для построения цифровых моделей химических объектов.
8. Контроль и оптимизация химико-технологических объектов.
9. Обработка химических сигналов.

10. Цифровое описание сложности химических объектов (строения органических соединений и систем химических реакций).
11. Искусственный интеллект и его применение в химии. Искусственные нейронные сети.
12. Искусственный интеллект. Философские и методологические проблемы, связанные с его применением в химии.
13. Предиктивный дизайн химических соединений.
14. Базы данных в химии. Химическое пространство.
15. Химическое пространство и связанные понятия (дескрипторы структуры и свойств, проекции химического пространства, триада «корреляция – статистическая модель – химическое пространство»).
16. Аддитивность в химии. Ее использование в математических и цифровых моделях.
17. Нечисленные разделы математики в химии.
18. Верификация и фальсификация цифровых моделей в химии.
19. Влияние математических и цифровых моделей на эволюцию концептуального аппарата химии.

Устный опрос

Устный индивидуальный опрос проводится после изучения новой темы с целью выяснения наиболее сложных вопросов, степени усвоения информации.

Вопросы для собеседования

Раздел 1

Моделирование в химии: физические, математические и цифровые модели. Способы представления химической информации. Цифровой язык для описания строения химических соединений. Сложность описания химических объектов.

Цифровые модели в химии. История возникновения. Типология цифровых моделей. Цифровые двойники. Преимущества и ограничения цифровых моделей, их релевантность основным понятиям химии и целесообразность использования.

Раздел 2

Компьютерное моделирование в химии. Степень детализации химических объектов в задачах компьютерного моделирования. Уровни описания строения химических объектов (сигнал, состав, топология, электронная структура). Основные подходы компьютерного моделирования строения химических соединений и химических реакций (обработка сигналов, квантовохимическое, топологическое, молекулярно-динамическое, мультимасштабное моделирование). Математический аппарат описания химических соединений и химических процессов.

Раздел 3

Цифровое представление и обработка химической информации. Машинные языки для описания молекул. Структурные, молекулярные, физико-химические дескрипторы. Корреляции «структура – свойство – функция».

Алгоритмический аппарат описания химических соединений и химических процессов.

Особенности цифрового описания биохимических объектов: противопоставление вещества-объект и вещества-функции.

Раздел 4

Data Science в химии. Базы химических данных.

Химическое пространство как база данных, как многомерная функция. Проекция химического пространства на гиперплоскости структурных и молекулярных дескрипторов. По-

иск новых химических соединений с полезными свойствами и проблемы «движения» в химическом пространстве.

Статистические закономерности в химии. Аналитическая зависимость, корреляция, закон. Физический смысл корреляций «структура – свойство».

Раздел 5

Общие сведения об искусственном интеллекте. Искусственный интеллект в химии. Искусственные нейронные сети в химии. Цифровое планирование синтеза. Компьютерный анализ сигналов сложных химических сред. Компьютерный анализ спектров сложных химических соединений.

Нечисленные разделы математики в химии. Химическая логика, алгебра химических множеств.

Взаимодействие человека и искусственных вычислительных систем. Расширение объектов исследования химии благодаря вычислительным системам. Изменение концептуально-го аппарата химии за счёт её взаимодействия с химией и информатикой.

Раздел 6

Особенности использования цифровых технологий в химии. Химический анализ естественных многокомпонентных сред (смесей природных соединений, выделяемых из растительного сырья, химический состав клетки, состав межзвездного вещества, нефти). Классификация химических объектов. Предиктивный дизайн химических соединений.

Особенности использования цифровых технологий в химической технологии. Контроль химико-технологических процессов. Оптимизация химико-технологических процессов.

Критерии и методика оценивания:

– «зачет» выставляется студенту, если точно используется специализированная терминология, показано уверенное владение темой;

– «не зачет» выставляется студенту, если нет общего понимания вопроса, имеются затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература

1. Сабилов Д.Ш. Цифровая химия – новое направление современной математической химии // Вестник Башкирского университета 2021, 26. Вып. 1 – С. 27-32.
2. Баскин И.И., Маджидов Т.И., Антипин И.С., Варнек А.А. Искусственный интеллект в синтетической химии: достижения и перспективы // Успехи химии 2017, 86. Вып. 11, С. 1127-1156.
3. Трач С. С., Зефилов Н. С. Комбинаторные модели и алгоритмы в химии. Лестница комбинаторных объектов и ее применение для формализации структурных задач органической химии // Принципы симметрии и системности в химии / под ред. Н. Ф. Степанова. М.: Изд-во МГУ, 1987. С. 54-86.
4. Раевский О.А. Моделирование соотношений «структура – свойство». – М.: Добросвет, 2015 г. – 288 с.
5. Sabirov D.Sh., Shepelevich I.S. Information entropy in chemistry: an overview // Entropy 2021, 23. Вып. 10 – Номер статьи 1240.

Дополнительная литература

6. Keith J. A., Vassilev-Galindo V., Cheng B., Chmiela S., Gastegger M., Müller K.-R., Tkatchenko A. Combining machine learning and computational chemistry for predictive insights into chemical systems // Chemical Reviews 2021 121, Вып. 16. С. 9816-9872.
7. Meuwly M. Machine learning for chemical reactions // Chemical Reviews 2021 121, Вып. 16. С. 10218-10239.
8. Karlov D.S., Sosnin S., Tetko, I.V., Fedorov M.V. Chemical space exploration guided by deep neural networks // RSC Advances 2021, 9, С. 5151-5157.
9. Huang B., von Lilienfeld A. *Ab initio* machine learning in chemical compound space // Chemical Reviews 2021 121, Вып. 16. С. 10001-10036.
10. Musil F., Grisafi A., Bartók A., Ortner C., Csányi G., Ceriotti M. Physics-inspired structural representations for molecules and materials // Chemical Reviews 2021 121, Вып. 16. С. 9759-9815.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные.
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019.

6. Материально-техническая база, необходимая 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
<p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория № 311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус)</p> <p>2. учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа: лаборатория № 101 (химфак корпус), лаборатория № 120 (химфак корпус)</p> <p>3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория № 311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p>4. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория № 311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p>5. помещения для самостоятельной работы: читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал №2 (физмат корпус-учебное), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (учебный корпус), читальный зал № 7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (химфак корпус)</p> <p>6. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: лаборатория № 416 (химфак корпус)</p>	<p align="center">Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p align="center">Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p align="center">Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p align="center">Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p align="center">Лаборатория № 101 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, аквадистиллятор ДЭ-4, кондуктометры, модуль “Термостат”, модуль “Универсальный контроллер”, холодильник ATLANT MXM 2835-90, поляриметр круговой СМ-3, термостаты -3 шт., весы аналитические Ohaus PA-64 C (65 г/0,0001 г), кондуктометр АНИОН 7020, весы технические, персональный компьютер Pentium 4, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц, кювета 100мм для поляриметра СМ-3 – 3 шт.</p> <p align="center">Лаборатория № 120 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, термостаты – 2шт., модуль “Электрохимия”, модуль “Универсальный контроллер”, модуль “Термохимический анализ”, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"СQ 100 еи (моноблок)</p> <p align="center">Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p align="center">Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные.</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019.</p>

<p>пус).</p>	<p style="text-align: center;">Читальный зал № 1</p> <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал №2</p> <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал № 5</p> <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал № 6</p> <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p style="text-align: center;">Читальный зал № 7</p> <p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p style="text-align: center;">Лаборатория № 418</p> <p>Учебная мебель, факсимильный аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5K(0,5кВТ; 2А,220/0-250В),3604, 99р Т.207/2-15, весы "Ohaus" PA64C (65г, 0,1мг) с поверкой, весы VIC-1500d1 (1500г. 100МГ, внешн.калибровка) ACCULAB, иономер И-160МИ с поверкой, комплекс вольтамперметрический СТА, компьютер в комплекте DEPO Neos 4601\Ю/монитор 20" Samsung VX2035/кпав./мышь, компьютер персональный №1 т.210-14/3, магнитная мешалка без нагрева Tolorino – 2шт, магнитная мешалка с нагревом и нанокерамич.поверх hG-MAG HS, метр-рН рН-150МИ (с гос.поверкой), монитор 19" LG L1919S BF Black (LCD<TFT,8ms, 1280*1024,250КД/М.1 400:1,4:3 D-Sub), персональный компьютер в составе с/блок/Сого J7-4770 (3.4)/H87/SYGA/HDD 500Gb, монитор ЖК"20"Веnс1.клавиатура+мышь, принтер Canon i-SENSYS MF3010, рН-метр рН-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIP LF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p> <p style="text-align: center;">Лаборатория № 416</p> <p>Атомно-абсорбционный спектрофотометр модель AA-7000, фирмы "Шимадзу", Япония, баллон с гелием марки А – 2 шт, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц/*1/, газовый хромато-масс-спектрометр модель GCMS-QP 2010PIUS, компьютер в составе: си-</p>	
--------------	---	--

	стемный блок, монитор, клавиатура, мышь, кондиционер QUATTROCUMA QV/QN-F12WA, ноутбук Fujitsu Lifebook F530 Intel Core i3-330M/4Gb/500Gb/ DVD-RW/ВТ/15.6"/Wi n7НВ+Office, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"CQ 100 eu (моноблок), электроплитка Irit IR-8200,1500Вт диаметр конфорки 185мм.	
--	--	--

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
 ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
 ФАКУЛЬТЕТ ХИМИЧЕСКИЙ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины «**Цифровые технологии в химии**»
 на 3 семестр
 Очная форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	2 ЗЕТ / 72 часа
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	12,2
лекций	12
практических / семинарских	-
лабораторных	-
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	59,8
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	-

Форма контроля:
 зачет 3 семестр

№	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР / Сем	ЛР	СР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Физические, математические и цифровые модели в химии. Особенности моделирования в химии. Характерные черты физических, математических, цифровых моделей. Информация в химии. Преимущества и ограничения цифровых моделей, их релевантность основным понятиям химии	2			10	Осн. [1, 4] Доп. [10]	Проработать лекцию	
2	Компьютерное моделирование в химии. Объект моделирования – уровни «химической реальности». Основные подходы компьютерного моделирования строения химических соединений и химических реакций	2			10	Осн. [2] Доп. [6]	Проработать лекции	
3	Цифровое представление и обработка химической	2			10	Осн. [2, 3, 5]	Проработать лекцию	

	информации. Цифровое описание химических объектов. Структурные, молекулярные, физико-химические дескрипторы							
4	Базы данных и Data Science в химии. Химическое пространство. Статистические закономерности в химии	2			10	Осн. [3, 4]	Проработать лекцию	
5	Искусственный интеллект в химии. Общие сведения об искусственном интеллекте. Искусственные нейронные сети в химии. Цифровое планирование синтеза. Нечисленные разделы математики в химии	2			10	Осн. [2, 4] Доп. [7-9]	Проработать лекцию	
6	Особенности использования цифровых технологий в химии и химической технологии. Предиктивный дизайн химических соединений. Контроль и оптимизация химико-технологических процессов	2			9,8	Осн. [1, 4]	Проработать лекцию	
	Итого	12			59,8			