

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ястребов Олег Александрович  
Должность: Ректор  
Дата подписания: 15.05.2026 12:05:31  
Уникальный программный ключ:  
ca953a01204891083f939673078ef1a989aae18a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»  
Факультет физико-математических и естественных наук**  
(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

### **КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ**

(наименование дисциплины/модуля)

**Рекомендована МССН для направления подготовки/специальности:**

#### **04.03.01 ХИМИЯ**

(код и наименование направления подготовки/специальности)

**Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):**

#### **ХИМИЯ**

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

**2026 г.**

## 1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина «Компьютерные технологии в химии» входит в программу бакалавриата «Химия» по направлению 04.03.01 «Химия» и изучается в 5 семестре 3 курса. Дисциплину реализует Кафедра физической и коллоидной химии. Дисциплина состоит из 11 разделов и 11 тем и направлена на изучение современных информационных технологий поиска и анализа научно-технической информации, методов работы со специализированными химическими базами данных, инструментов молекулярного моделирования, библиографических менеджеров, а также нейросетевых сервисов и языков программирования для автоматизации обработки экспериментальных данных в химии

Целью освоения дисциплины является формирование у обучающихся системы знаний и практических навыков по эффективному использованию современных информационных технологий, специализированного программного обеспечения и цифровых сервисов для поиска, систематизации, моделирования и комплексного анализа научно-исследовательской информации в области химии

## 2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Компьютерные технологии в химии» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

*Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)*

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
УК-12	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	УК-12.1 Осуществляет поиск нужных источников информации и данных, воспринимает, анализирует, запоминает и передает информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач;; УК-12.2 Проводит оценку информации, ее достоверность, строит логические умозаключения на основании поступающих информации и данных.;
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов, свойств веществ и материалов;; ОПК-1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии;;
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности;; ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.;
ОПК-5	Способен понимать принципы	ОПК-5.1 Использует современные IT-технологии при сборе,

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
	работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	анализе, обработке и представлении информации химического профиля;; ОПК-5.2 Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности.;
ОПК-7	Способен использовать цифровые технологии и методы в профессиональной деятельности в области химии для: изучения и моделирования объектов профессиональной деятельности, анализа данных, представления информации и пр.	ОПК-7.1 Применяет цифровые технологии для поиска, обработки и анализа научной информации в области химии;; ОПК-7.2 Использует цифровые технологии для постановки исследовательских задач;; ОПК-7.3 Анализирует экспериментальные данные и применяет вычислительные методы для решения поставленных задач;; ОПК-7.4 Использует цифровые платформы для научных исследований.;
ПК-2	Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных);; ПК-2.2 Собирает, обрабатывает, анализирует и обобщает (под руководством специалиста более высокой квалификации) результаты поиска информации по заданной тематике в выбранной области исследований.;

### 3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Компьютерные технологии в химии» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Компьютерные технологии в химии».

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
УК-12	Способен: искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	Цифровая грамотность; Основы экономики и менеджмента; Искусственный интеллект в химии; <i>Продвинутый Excel**;</i> <i>Основы программирования на Python**;</i> <i>Инфографика и технология презентаций**;</i> <i>SQL. Начальный курс**;</i> <i>Python для анализа данных**;</i> <i>Цифровые деловые коммуникации**;</i>	Учебная практика; Научно -исследовательская работа; Преддипломная практика;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Неорганическая химия; Аналитическая химия; Органическая химия;	Учебная практика; Научно -исследовательская работа; Физическая химия; Химическая технология; Строение вещества; Коллоидная химия; Высокомолекулярные соединения; Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа; Хроматография; Основы электронной и колебательной спектроскопии; Основы ЯМР; Основы масс-спектрометрии; Химические основы биологических процессов и экологии; Избранные главы химии; Экспериментальные методы исследования в химии;
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Цифровая грамотность;	Научно -исследовательская работа; Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа; Хроматография; Основы электронной и колебательной спектроскопии; Основы ЯМР; Основы масс-спектрометрии;
ОПК-5	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	Цифровая грамотность;	
ОПК-7	Способен использовать цифровые технологии и методы в профессиональной деятельности в области химии для: изучения и моделирования объектов профессиональной деятельности, анализа данных, представления информации и пр.	Цифровая грамотность;	Учебная практика; Научно -исследовательская работа;
ПК-2	Способен оказывать информационную		Научно -исследовательская работа;

<b>Шифр</b>	<b>Наименование компетенции</b>	<b>Предшествующие дисциплины/модули, практики*</b>	<b>Последующие дисциплины/модули, практики*</b>
	поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы		Преддипломная практика; Экспериментальные методы исследования в химии;

\* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

\*\* - элективные дисциплины /практики

#### 4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Компьютерные технологии в химии» составляет «3» зачетные единицы.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			5
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	36		36
Лекции (ЛК)	0		0
Лабораторные работы (ЛР)	36		36
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	54		54
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	18		18
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>ак.ч.</b>	<b>108</b>	<b>108</b>
	<b>зач.ед.</b>	<b>3</b>	<b>3</b>

## 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
Раздел 1	Цифровые сервисы современной библиотеки	1.1	Цифровые сервисы современной библиотеки	Навигация по электронным ресурсам УНИБЦ (НБ) РУДН. Единое окно поиска (ЕОП). Организация удаленного доступа к базам данных через прокси-сервер. Работа с корпоративной почтой и учетными записями для аутентификации	ЛР
Раздел 2	Общие поисковые системы и алгоритмы	2.1	Общие поисковые системы и алгоритмы	Понятие поисковой системы и каталога. Устройство поисковых движков. Язык запросов и поисковые команды (site:, filetype:, логические операторы AND/OR). Работа с Google Scholar, Yandex и специализированными наукометрическими инструментами	ЛР
Раздел 3	Русскоязычные базы данных и ресурсы	3.1	Русскоязычные базы данных и ресурсы	Работа с платформой eLibrary.ru и Российским индексом научного цитирования (РИНЦ). Каталог журналов, поиск по тематическим рубрикам и организациям. Ресурсы открытого доступа (КиберЛенинка). Профильные химические библиотеки России	ЛР
Раздел 4	Зарубежные электронные библиотеки и издательства	4.1	Зарубежные электронные библиотеки и издательства	Обзор мировых системообразующих издательств (Elsevier ScienceDirect, Springer Nature, Wiley, ACS, RSC). Работа с агрегаторами (EBSCO, JSTOR). Использование уточняющих фильтров и персональных кабинетов для мониторинга новых публикаций	ЛР
Раздел 5	Базы данных диссертаций и авторефератов	5.1	Базы данных диссертаций и авторефератов	Российские источники: ЭБС РУДН, диссертации РГБ, портал ВАК. Международные агрегаторы: ND LTD, OATD, ProQuest. Национальные порталы (Франция, Испания, Индия). Стратегии поиска первичных научных текстов	ЛР
Раздел 6	Справочники физико-химических данных (NIST)	6.1	Справочники физико-химических данных (NIST)	Поиск термодинамических и спектральных данных в NIST Chemistry WebBook. Расчет давления насыщенного пара (уравнение Антуана), энтальпии испарения и констант химического равновесия. Анализ ИК- и масс-спектров	ЛР
Раздел 7	Библиографические менеджеры (Zotero)	7.1	Библиографические менеджеры (Zotero)	Стили цитирования (ГОСТ, Vancouver, APA). Автоматизация оформления списков литературы. Установка и настройка Zotero. Использование Zotero Connector и интеграция с текстовыми редакторами (MS Word). Работа с облачным хранилищем ссылок	ЛР
Раздел 8	Молекулярное	8.1	Молекулярное моделирование (Avogadro)	Интерфейс молекулярного редактора. Построение 3D-моделей	ЛР

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Наименование темы		Содержание темы	Вид учебной работы*
	моделирование (Avogadro)			органических и неорганических молекул. Оптимизация геометрии (силовые поля). Визуализация молекул (Ball and Stick, VdW spheres). Конструкторы пептидов и нуклеиновых кислот (ДНК/РНК)	
Раздел 9	ИИ-инструменты в научной работе химика	9.1	ИИ-инструменты в научной работе химика	Обзор AI-сервисов для суммаризации и анализа статей (Open Read, Scispace, Explain Paper). Визуализация карт знаний (Heuristi.ca). Специализированные химические нейросети (ChemCrow, IBM RXN) для планирования синтеза и предсказания свойств	ЛР
Раздел 10	Основы Python и облачных вычислений	10.1	Основы Python и облачных вычислений	Работа в облачной среде Yandex DataSphere. Использование Jupyter Notebook. Основы синтаксиса Python для химических расчетов. Автоматизация обработки экспериментальных данных и визуализация графиков реакций	ЛР
Раздел 11	Комплексный анализ научной информации	11.1	Комплексный анализ научной информации	Гибридный подход: комбинация классических баз данных и AI-ассистентов. Создание аннотированной библиографии по заданной химической теме. Верификация данных из различных источников	ЛР

\* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

## 6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Дисплейные классы ФФМиЕН РУДН. Для проведения лабораторных занятий используется мультимедийный компьютерный класс с доступом к сети Internet, со свободным и лицензионным программным обеспечением: (Корпус: ул. Орджоникидзе, д.3, ДК, читальный зал библиотеки)
Для самостоятельной работы	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Мультимедийный проектор, демонстрационные материалы для работы, пакет программного обеспечения под Linux. браузер Firefox (лицензия MPL-2.0) или браузер Chrome (лицензия Google Chrome Terms of Service); Adobe Reader (Adobe Software License Agreement)

\* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

## 7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Соловьев, А. С. Компьютерные технологии в химии : учебное пособие для вузов / А. С. Соловьев. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2024. — 156 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-11666-3.

2. Пономарева, И. С. Информационные технологии в химии : учебное пособие / И. С. Пономарева. — Москва : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2021. — 140 с. — ISBN 978-5-7237-1854-8.

Дополнительная литература:

1. Куцев Л. Компьютерные технологии: опыт использования // Высшее образование в России , 2004. [Электронный ресурс]

2. Степановских Е.И., Кушнарева Т.В. Применение информационных технологий в преподавании курса «физическая химия» // Интернет-журнал Науковедение , 2014. [Электронный ресурс]

3. Шашков В.Б. Компьютерная модель эксперимента // Вестник Оренбургского государственного университета , 2007, [Электронный ресурс]

*Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:*

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН

<http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru)

- ЭБС «Троицкий мост»

2. Базы данных и поисковые системы

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации

<http://docs.cntd.ru/>

- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>

- поисковая система Google <https://www.google.ru/>

- реферативная база данных SCOPUS

<http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

*Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля\*:*

1. Курс лекций по дисциплине «Компьютерные технологии в химии».

\* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

**РАЗРАБОТЧИК:**

доцент кафедры физической и  
коллоидной химии

*Должность, БУП*

*Подпись*

Братчикова Ирина  
Геннадьевна

*Фамилия И.О.*

**РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:**

Заведующий кафедрой  
физической и коллоидной  
химии

*Должность БУП*

*Подпись*

Чередниченко Александр  
Генрихович

*Фамилия И.О.*

**РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:**

Заведующий кафедрой общей и  
неорганической химии

*Должность, БУП*

*Подпись*

Хрусталеv Виктор  
Николаевич

*Фамилия И.О.*