

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО
решением Ученого совета ННГУ
протокол № 12 от 09.11.2023 г.

Рабочая программа дисциплины
Компьютерные технологии в науке и образовании

Уровень высшего образования
Магистратура

Направление подготовки / специальность
04.04.01 - Химия

Направленность образовательной программы
Химическая технология для микроэлектроники

Форма обучения
очная, очно-заочная

г. Нижний Новгород

2023 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.О.02.01 Компьютерные технологии в науке и образовании относится к обязательной части образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
УК-6: Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6-1: Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6-2: Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6-3: Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда	УК-6-1: Способен на выполнение самостоятельных заданий по дисциплине УК-6-2: Способен планировать профессиональную работу с применением компьютерных технологий УК-6-3: Способен совершенствовать свою профессиональную деятельность с применением компьютерных технологий	Дискуссия Практическая задача	Экзамен: Контрольные вопросы
ОПК-1: Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов,	ОПК-1-1: Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1-2: Использует современное оборудование, программное обеспечение и	ОПК-1-1: Знать Основные возможности, ограничения и способы использования компьютерных баз данных о свойствах веществ, программного обеспечения для предсказания этих свойств и программного обеспечения для выполнения расчетов, подготовки документов,	Дискуссия	Экзамен: Контрольные вопросы

<p>программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	<p>профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук</p> <p>ОПК-1-3: Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач</p>	<p>представления результатов научной и образовательной деятельности</p> <p>Уметь Оценивать необходимость использования тех или иных технологий для решения поставленной задачи, уметь определять их возможности и ограничения, выбирать наиболее подходящие средства для выполнения научных и образовательных задач</p> <p>Владеть навыками применения компьютерных технологий для поиска информации о свойствах веществ, предсказания этих свойств, выполнения расчетов, подготовки документов, представления результатов научной и образовательной деятельности</p> <p>ОПК-1-2:</p> <p>Знать Основные возможности, ограничения и способы использования компьютерных баз данных о свойствах веществ, программного обеспечения для предсказания этих свойств и программного обеспечения для выполнения расчетов, подготовки документов, представления результатов научной и образовательной деятельности</p> <p>Уметь Оценивать необходимость использования тех или иных технологий для решения поставленной задачи, уметь определять их возможности и ограничения, выбирать наиболее подходящие средства для выполнения научных и образовательных задач</p> <p>Владеть навыками</p>		
---	--	--	--	--

		<p>применения компьютерных технологий для поиска информации о свойствах веществ, предсказания этих свойств, выполнения расчетов, подготовки документов, представления результатов научной и образовательной деятельности</p> <p><i>ОПК-1-3:</i> Знать Основные возможности, ограничения и способы использования компьютерных баз данных о свойствах веществ, программного обеспечения для предсказания этих свойств и программного обеспечения для выполнения расчетов, подготовки документов, представления результатов научной и образовательной деятельности</p> <p>Уметь Оценивать необходимость использования тех или иных технологий для решения поставленной задачи, уметь определять их возможности и ограничения, выбирать наиболее подходящие средства для выполнения научных и образовательных задач</p> <p>Владеть навыками применения компьютерных технологий для поиска информации о свойствах веществ, предсказания этих свойств, выполнения расчетов, подготовки документов, представления результатов научной и образовательной деятельности</p>		
--	--	--	--	--

<p>ОПК-3: Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>ОПК-3-1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности</p> <p>ОПК-3-2: Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности</p>	<p>ОПК-3-1:</p> <p>Знать Основные возможности, ограничения и способы использования программного обеспечения для выполнения квантовохимических и молекулярно-динамических расчетов, обработки экспериментальных данных, построения графиков, создания собственных библиографических баз данных</p> <p>Уметь Оценивать необходимость использования тех или иных технологий для решения для выполнения квантовохимических и молекулярно-динамических расчетов, обработки экспериментальных данных, построения графиков, создания собственных библиографических баз данных</p> <p>Владеть навыками применения компьютерных технологий для обработки экспериментальных данных, построения графиков, создания собственных библиографических баз данных</p> <p>ОПК-3-2:</p> <p>Знать Основные возможности, ограничения и способы использования программного обеспечения для выполнения квантовохимических и молекулярно-динамических расчетов, обработки экспериментальных данных, построения графиков, создания собственных библиографических баз данных</p> <p>Уметь Оценивать необходимость использования тех или иных технологий для решения для выполнения квантовохимических и молекулярно-динамических расчетов, обработки экспериментальных данных, построения графиков,</p>	<p>Дискуссия</p>	<p>Экзамен: Контрольные вопросы</p>
--	--	---	------------------	---

		создания собственных библиографических баз данных Владеть навыками применения компьютерных технологий для обработки экспериментальных данных, построения графиков, создания собственных библиографических баз данных		
--	--	---	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная	очно-заочная
Общая трудоемкость, з.е.	5	5
Часов по учебному плану	180	180
в том числе		
аудиторные занятия (контактная работа):		
- занятия лекционного типа	16	36
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	48	18
- КСР	2	2
самостоятельная работа	60	88
Промежуточная аттестация	54 экзамен	36 экзамен

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)		в том числе							
			Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы	
	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы		Всего					
							о ф о	о з ф о		
1. Компьютерное представление и кодирование химических структур	31	35	4	9	12	4	16	13	15	22
2. Молекулярные визуализаторы и редакторы, программы для молекулярного моделирования	31	35	4	9	12	4	16	13	15	22
3. Программы для диалоговых математических расчетов, обработки экспериментальных результатов и графического представления данных	31	36	4	9	12	5	16	14	15	22
4. Поиск научной информации в сети интернет, системы библиографического поиска и базы данных	31	36	4	9	12	5	16	14	15	22

Аттестация	54	36								
КСР	2	2					2	2		
Итого	180	180	16	36	48	18	66	56	60	88

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

- электронный курс "Компьютерные технологии в науке и образовании" (<https://e-learning.unn.ru/course/view.php?id=3592>).
- открытый онлайн-курс МООС "-" (-).
- Учебно-методические материалы:
- Игнатов С.К. Квантовохимическое моделирование атомно-молекулярных процессов. Учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского, 2019. – 94 С.

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Дискуссия) для оценки сформированности компетенции УК-6

1. Почему возникает необходимость выработки специальных методов компьютерного представления химических структур
2. Что такое молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы?
3. Какие молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы вы знаете?

Типовые задания (оценочное средство - Дискуссия) для оценки сформированности компетенции ОПК-1

1. Особенности кодов ROSDAL, SMILES, SLN, InChi, InChiKeys Описание химических структур на основе теории графов Что такое граф?
2. Что такое матрица связности?
3. Что такое матрица порядков связей?

Типовые задания (оценочное средство - Дискуссия) для оценки сформированности компетенции ОПК-3

1. Российские поисковые системы и справочники
2. Международные поисковые системы и справочники
3. Каковы возможности и особенности работы систем ISI Web of Knowledge, ScienceDirect, Scopus, Scirus, ScholarGoogle, e-LIBRARY

Критерии оценивания (оценочное средство - Дискуссия)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Допустимый уровень знаний выше минимального. Продemonстрированы основные умения. При решении типовых заданий могут быть негрубые ошибки. Имеется набор навыков выше минимального для решения стандартных задач с некоторыми недочетами

не зачтено	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения и базовые навыки. Или невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.
------------	---

5.1.2. Типовые задания (оценочное средство – практическая задача) для оценки сформированности компетенции УК-6

Задание 1. Вы сделали серию экспериментальных измерений (t_i , C_i). Какие программные средства вы будете использовать, чтобы провести статистический анализ этих данных.

Задание 2. Вы сделали серию экспериментальных измерений (t_i , C_i). Какие программные средства вам понадобятся, чтобы выполнить графическое представление этих данных.

Задание 3. Вы сделали экспериментальные измерения физико-химических свойства известного соединения. Какие программные средства вам понадобятся, чтобы сравнить ваши результаты с результатами, полученными другими исследователями.

Оценочное средство - Практическая задача

Критерии оценивания (оценочное средство – практическая задача)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач.
отлично	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.
очень хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.
хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок. Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме. Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения и базовые навыки.
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Отсутствие минимальных умений. Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки и. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными и несущественными недочетами, выполнены все задания в	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов

						полном объеме	
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторым и недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторым и недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации

5.3.1 Типовые задания, выносимые на промежуточную аттестацию:

Оценочное средство - Контрольные вопросы

Экзамен

Критерии оценивания (Контрольные вопросы - Экзамен)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно»
отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично»
очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо»

хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «хорошо»
удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо»
плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

Типовые задания (Контрольные вопросы - Экзамен) для оценки сформированности компетенции УК-6 (Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки)

1. Почему возникает необходимость выработки специальных методов компьютерного представления химических структур
2. Что такое молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы?
3. Какие молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы вы знаете?
Задачи визуализации молекулярных поверхностей
4. Задачи визуального анализа молекулярных колебаний
5. Что такое генераторы конформаций, по каким принципам они работают?

Типовые задания (Контрольные вопросы - Экзамен) для оценки сформированности 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)

1. Особенности кодов ROSDAL, SMILES, SLN, InChi, InChiKeys Описание химических структур на основе теории графов Что такое граф?
2. Что такое матрица связности?
3. Что такое матрица порядков связей?
4. Что такое матрица межатомных расстояний?
5. Особенности записи матрицы декартовых координат в форматах XYZ, NXYZ, DNXYZ
6. Что такое Z-матрица?
7. Особенности Z-матриц в программах Gaussian, MOPAC, Gamess
8. Что такое псевдоатомы, зачем они применяются?
9. Какие форматы файлов используются для описания и хранения структурной информации? Какие редакторы математических формул вы знаете?
10. Какие программы для построения графиков вы знаете?
11. Какие программы для статистической обработки данных вы знаете?
12. Что такое аналитические и численные вычисления, диалоговые вычисления, вычисления по заданному алгоритму?
13. Какие программы для аналитических и численных диалоговых вычислений вы знаете? Способы хранения информации в сети Интернет
14. Способы адресации и организации доменов и сайтов Задачи информационного поиска в сети Интернет Что такое справочные системы?

15. Что такое поисковые системы?
16. Что такое мета-поисковые системы?
17. Что такое язык запросов поисковых систем?

Типовые задания (Контрольные вопросы - Экзамен) для оценки сформированности компетенции ОПК-3 (Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности)

4. Российские поисковые системы и справочники
5. Международные поисковые системы и справочники
6. Каковы возможности и особенности работы систем ISI Web of Knowledge, ScienceDirect, Scopus, Scirus, ScholarGoogle, e-LIBRARY
7. Каковы возможности и особенности работы баз данных в NIST Chemistry Webbook, NIST Chemical Kinetics Database
8. Какие базы данных экспериментальных физико-химических свойств вы знаете? Получение статей с сайтов издательств и журналов в сети Интернет
Назначение и особенности работы систем EndNote, Mendeley, Zotero
9. Что такое метод молекулярного моделирования?
10. Особенности методов молекулярной механики, метода квантовой химии, метода молекулярной динамики, метода Монте-Карло
11. Какие программы для выполнения квантовохимических и молекулярно-динамических расчетов вы знаете?
12. Какие программы для визуализации результатов молекулярного моделирования вы знаете?

1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Кларк Тим. Компьютерная химия: практ. рук. по расчетам структуры и энергии молекул / пер. с англ. А. А. Коркина; под ред. В. С. Матрюкова, Ю. Н. Панченко. - М.: Мир, 1990. - 381, [3] с : ил. - ISBN 5-03-001325-3 : 2.20., 1 экз.
2. Яхонтова И. М. Компьютерные технологии в науке, производстве и образовании: учебное пособие / Яхонтова И. М., Крамаренко Т. А. - Краснодар : КубГАУ, 2019. - 86 с. - Книга из коллекции КубГАУ - Информатика. - ISBN 978-5-00097-906-8., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=806751&idb=0>.
3. Малахова Ю. Н. Информационные технологии в химии полимеров: учебно-методическое пособие / Малахова Ю. Н., Григорьев Т. Е., Чвалун С. Н. - Москва : РТУ МИРЭА, 2022. - 47 с. - Книга из коллекции РТУ МИРЭА - Химия., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=828305&idb=0>.

Дополнительная литература:

1. Изюмов А. А. Компьютерные технологии в науке и технике / Изюмов А. А., Коцубинский В. П. - Москва: ТУСУР, 2011. - 150 с. - Библиогр.: доступна в карточке книги, на сайте ЭБС Лань. - Книга из коллекции ТУСУР - Информатика., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=712250&idb=0>.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

<https://www.qchem.unn.ru/>

<https://www.coursera.org/learn/modeling-simulation-natural-processes>

<http://www.tandf.co.uk/journals/titles/08927022.asp>

<http://www.lmms.ru/>

<https://web.archive.org/web/20051230142353/http://cmm.info.nih.gov/modeling/>

2. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по направлению 04.04.01 - Химия.

Автор(ы): Игнатов Станислав Константинович, доктор химических наук, профессор.

Заведующий кафедрой: Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 29.09.2022 г., протокол № 1.