

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 от
«___» _____ 20__ г. № ___

Рабочая программа дисциплины

Компьютерные технологии в науке и образовании

Уровень высшего образования
магистратура

Направление подготовки / специальность
18.04.01 «Химическая технология»

Направленность образовательной программы
Химическая технология

Форма обучения
очная

Нижний Новгород

2022 год

Лист актуализации

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

___ 20__ г..

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2022-2023 учебном году на заседании кафедры физической химии.

Протокол от ___ 20__ г. № ___

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

___ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2023-2024 учебном году на заседании кафедры

Протокол от ___ 20__ г. № ___

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

___ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2024-2025 учебном году на заседании кафедры

Протокол от ___ 20__ г. № ___

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

___ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2025-2026 учебном году на заседании кафедры

Протокол от ___ 20__ г. № ___

Зав. кафедрой _____

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Компьютерные технологии в науке и образовании» входит в модуль «Математический и естественнонаучный цикл» Блока 1 ОПОП (Б1.О.02.01.) по направлению подготовки 04.04.01 «Химия», является обязательной дисциплиной для освоения студентами на первом году обучения в 1 семестре на очной форме обучения и во 2 семестре на очно-заочной форме обучения, соответственно.

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**	
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	<p>УК-1.1. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними</p> <p>УК-1.2. Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению;</p> <p>УК-1.3. Критически оценивает надежность источников информации, работает с противоречивой информацией из разных источников.</p> <p>УК-1.4. Разрабатывает и содержательно аргументирует стратегию решения проблемной ситуации на основе системного и междисциплинарного подходов</p> <p>УК-1.5. Использует</p>	<p>Знать основные задачи, направления и способы использования компьютерных технологий для решения научных и образовательных задач</p> <p>Уметь оценивать необходимость использования тех или иных технологий для решения поставленной задачи, уметь определять их возможности и ограничения</p> <p>Владеть навыками применения тех или иных технологий для решения поставленной задачи</p>	ФОС по дисциплине «КТНО»

	логику-методологический инструментарий для критической оценки современных концепций философского и социального характера в своей предметной области		
<p>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</p>	<p>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</p> <p>ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и 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>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>ФОС по дисциплине «КТНО»</p>

<p>ОПК-3</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>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>ФОС по дисциплине «КТНО»</p>
---------------------	--	---	---------------------------------

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная форма обучения	очно-заочная форма обучения
Общая трудоемкость	5 ЗЕТ	5 ЗЕТ
Часов по учебному плану	180	180
в том числе		
аудиторные занятия (контактная работа):		
- занятия лекционного типа	16	36
- занятия семинарского типа	48	18
-КСИРФ	2	
самостоятельная работа	60	88
Промежуточная аттестация – экзамен	54	36

3.2. Содержание дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)			В том числе														
				Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы												Самостоятельная работа обучающегося, часы		
				из них														
	Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Всего	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная
Очная					Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная
1. Компьютерное представление и кодирование химических структур	31	37		4	9		12	6					16	15		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	35		4	9		12	4					16	13		15	22	
4. Поиск научной информации в сети интернет, системы библиографического поиска и базы данных	31	35		4	9		12	4					16	13		15	22	
Контроль самостоятельной работы	2	2																
Промежуточная аттестация – экзамен	54	36																
Итого	180	180		16	36		48	18					64	54		60	88	

Текущий контроль успеваемости реализуется в рамках занятий семинарского типа, групповых консультаций. Промежуточная аттестация проходит в *традиционных формах (экзамен)*

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студентов в процессе изучения дисциплины предполагает чтение учебной и научной литературы, приведенной в разделе 7 данной программы, решение задач по тематическим разделам дисциплины. Учебники и задачки имеют в наличии в библиотеке в необходимом количестве, а также доступны на соответствующих Интернет-сайтах. Виды самостоятельной работы обучающегося: проработка материала лекций, решение домашних заданий, заданных на практических занятиях, подготовка к контрольным работам.

Контрольные вопросы и задания для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведены в п. 6.2.

5. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю), включающий:

5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	Шкала оценивания сформированности 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 незначительных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	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.	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными незначительными недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом. 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 некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценки при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	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»
не зачтено	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»

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения.

5.2.1 Контрольные вопросы

Вопросы	Код формируемой компетенции
<p>Почему возникает необходимость выработки специальных методов компьютерного представления химических структур</p> <p>Что такое молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы?</p> <p>Какие молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы вы знаете?</p> <p>Задачи визуализации молекулярных поверхностей</p> <p>Задачи визуального анализа молекулярных колебаний</p> <p>Что такое генераторы конформаций, по каким принципам они работают?</p> <p>Особенности кодов ROSDAL, SMILES, SLN, InChi, InChiKeys</p>	УК-1

<p>Описание химических структур на основе теории графов Что такое граф? Что такое матрица связности? Что такое матрица порядков связей? Что такое матрица межатомных расстояний? Особенности записи матрицы декартовых координат в форматах XYZ, NXYZ, DNXYZ Что такое Z-матрица? Особенности Z-матриц в программах Gaussian, МОРАС, Gamess</p>	<p>ОПК-1</p>
<p>Что такое псевдоатомы, зачем они применяются? Какие форматы файлов используются для описания и хранения структурной информации? Какие редакторы математических формул вы знаете? Какие программы для построения графиков вы знаете? Какие программы для статистической обработки данных вы знаете? Что такое аналитические и численные вычисления, диалоговые вычисления, вычисления по заданному алгоритму? Какие программы для аналитических и численных диалоговых вычислений вы знаете? Способы хранения информации в сети Интернет Способы адресации и организации доменов и сайтов Задачи информационного поиска в сети Интернет Что такое справочные системы? Что такое поисковые системы? Что такое мета-поисковые системы? Что такое язык запросов поисковых систем?</p>	<p>ОПК-1</p>
<p>Российские поисковые системы и справочники Международные поисковые системы и справочники Каковы возможности и особенности работы систем ISI Web of Knowledge, ScienceDirect, Scopus, Scirus, ScholarGoogle, e-LIBRARY Каковы возможности и особенности работы баз данных в NIST Chemistry Webbook, NIST Chemical Kinetics Database 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 Что такое метод молекулярного моделирования? Особенности методов молекулярной механики, метода квантовой химии, метода молекулярной динамики, метода Монте-Карло Какие программы для выполнения квантовохимических и молекулярно-динамических расчетов вы знаете? Какие программы для визуализации результатов молекулярного моделирования вы знаете?</p>	<p>ОПК-3</p>

5.2.2. Типовые тестовые задания для оценки сформированности компетенции УК-1

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.

5.2.3. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ОПК-1

Задание 1. Вы хотели бы предсказать структурные характеристики молекулы, которую собираетесь синтезировать. Какие методы и программы вам потребуются?

Задание 2. Какими способами можно задать структуру молекулы, которую вы собираетесь изучить методами вычислительной химии.

Задание 3. Вы получили структурные данные для молекулы нового соединения. Какими программными средствами вы можете визуализировать эти данные?

5.2.4. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ОПК-3

Задание 1. Какие базы данных вы будете использовать, чтобы найти информацию о способах синтеза требуемого вам соединения?

Задание 2. Какие базы данных вы бы использовали, чтобы найти публикации по теме вашей магистерской диссертации?

Задание 3. Какими программными средствами вы бы воспользовались при написании текста магистерской диссертации, содержащей структурные химические формулы, математические формулы, поверхности электронной плотности молекулы, графики экспериментальных зависимостей и список литературы?

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Положение «О проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в ННГУ», утверждённое приказом ректора ННГУ от 13.02.2014 г. № 55-ОД.

2. Положение о фонде оценочных средств, утверждённое приказом ректора ННГУ от 10.06.2015 г. № 247-ОД

3. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990. – 384 с.

б) дополнительная литература:

4. Chemoinformatics. A Textbook. Eds.: Gasteiger J., Engel T. Wiley-VCH, 2003, 649p.

в) 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/>

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины может быть найдена в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой также предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Помещения представляют собой учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных программой (*308 и 125 ауд., 5 корп.*), оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения: *видеопроектор, ноутбук.*

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 ФГОС ВО с учетом рекомендаций и ОПОП ВО по направлению подготовки 04.04.01 – Химия, реализуемого на химическом факультете, направленность – «Неорганическая химия».

Автор:

профессор кафедры ФХ, д.х.н. _____ Игнатов С.К.

Рецензент:

к.ф.-м.н., доцент ИТММ _____ Разуваев А.Г.

Заведующий кафедрой физической химии,

д.х.н., профессор _____ Маркин А.В.