

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 президиума Ученого совета ННГУ

протокол № 1 от 16.01.2024 г.

**Рабочая программа дисциплины**

Компьютерные технологии в науке и образовании

---

Уровень высшего образования

Магистратура

---

Направление подготовки / специальность

04.04.01 - Химия

---

Направленность образовательной программы

Физическая химия

---

Форма обучения

очно-заочная

---

г. Нижний Новгород

2024 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	Экзамен: Контрольные вопросы
ОПК-1: Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного	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 профессиональные базы	ОПК-1.1: Знать основные возможности, ограничения и способы использования компьютерных баз данных о свойствах веществ.  Уметь оценивать необходимость использования тех или иных технологий для решения поставленной задачи	Дискуссия	Экзамен: Контрольные вопросы

<p>обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	<p>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>Владеть навыками применения компьютерных технологий для поиска информации о свойствах веществ</p> <p>ОПК-1.2:</p> <p>Знать основные возможности, ограничения и способы использования программного обеспечения для предсказания свойств веществ и программного обеспечения для выполнения расчетов</p> <p>Уметь определять возможности и ограничения тех или иных технологий для решения поставленной задачи</p> <p>Владеть навыками применения компьютерных технологий для выполнения расчетов</p> <p>ОПК-1.3:</p> <p>Знать основные возможности, ограничения и способы подготовки документов, представления результатов научной и образовательной деятельности</p> <p>Уметь выбирать наиболее подходящие средства для выполнения научных и образовательных задач</p> <p>Владеть навыками применения компьютерных технологий для подготовки документов, представления результатов научной и образовательной деятельности</p>		
<p>ОПК-3: Способен использовать вычислительные методы и адаптировать</p>	<p>ОПК-3.1: Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля</p>	<p>ОПК-3.1:</p> <p>Знать основные возможности, ограничения и способы использования программного обеспечения для</p>	<p>Дискуссия</p>	<p>Экзамен: Контрольные вопросы</p>

<p>существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>ОПК-3.2: Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности</p> <p>ОПК-3.3: Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием</p>	<p>выполнения квантовохимических и молекулярно-динамических расчетов.</p> <p>Уметь оценивать необходимость использования тех или иных технологий для решения для выполнения квантовохимических и молекулярно-динамических расчетов.</p> <p>Владеть навыками применения компьютерных технологий для обработки экспериментальных данных.</p> <p>ОПК-3.2:</p> <p>Знать основные возможности, ограничения и способы обработки экспериментальных данных и построения графиков.</p> <p>Уметь оценивать необходимость обработки экспериментальных данных и построения графиков.</p> <p>Владеть навыками применения компьютерных технологий построения графиков.</p> <p>ОПК-3.3:</p> <p>Знать основные возможности, ограничения и способы создания собственных библиографических баз данных.</p> <p>Уметь оценивать необходимость использования тех или иных технологий для создания собственных библиографических баз данных</p> <p>Владеть навыками применения компьютерных технологий для создания собственных библиографических баз данных</p>		
--	---	--	--	--

### 3. Структура и содержание дисциплины

#### 3.1 Трудоемкость дисциплины

	<b>очно-заочная</b>
<b>Общая трудоемкость, з.е.</b>	<b>3</b>
<b>Часов по учебному плану</b>	<b>108</b>
в том числе	
<b>аудиторные занятия (контактная работа):</b>	
- занятия лекционного типа	<b>18</b>
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	<b>18</b>
- КСР	<b>2</b>
<b>самостоятельная работа</b>	<b>34</b>
<b>Промежуточная аттестация</b>	<b>36</b> <b>Экзамен</b>

### 3.2. Содержание дисциплины

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

Наименование 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	
	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0
1. Компьютерное представление и кодирование химических структур	18	5	5	10	8
2. Молекулярные визуализаторы и редакторы, программы для молекулярного моделирования	16	4	4	8	8
3. Программы для диалоговых математических расчетов, обработки экспериментальных результатов и графического представления данных	16	4	4	8	8
4. Поиск научной информации в сети интернет, системы библиографического поиска и базы данных	20	5	5	10	10
Аттестация	36				
КСР	2			2	
Итого	108	18	18	38	34

#### Содержание разделов и тем дисциплины

1. Методы компьютерного представления химических структур. Особенности кодов ROSDAL, SMILES, SLN, InChi, InChiKeys Описание химических структур на основе теории графов. Определение графа. Виды графов. Матрица смежности (связности). Матрица порядков связей. Матрица межатомных расстояний. Их назначение, особенности, возможности применения. Задачи перечисления и канонизации графов, представление графов в виде текстовых строк. Применение в химии. Методы компьютерного представления химических структур. Особенности кодов ROSDAL, SMILES, SLN, InChi, InChiKeys. Описание химических структур в программах молекулярного моделирования.

Форматы файлов для описания и хранения структурной информации. Особенности записи матрицы декартовых координат в форматах XYZ, NXYZ, DNXYZ. Z-матрица.

2. Молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы. Задачи и виды визуализации молекулярных поверхностей. Задачи визуального анализа молекулярных колебаний. Генераторы конформаций их применение и принципы работы.

3. Редакторы математических формул. Их назначение и особенности. Программы для построения графиков, их особенности. Программы для статистической обработки данных. Их назначение и особенности. Аналитические и численные вычисления. Диалоговые вычисления. Программы для аналитических и численных диалоговых вычислений. Их особенности и возможности.

4. Задачи информационного поиска в сети Интернет. Справочные системы. Поисковые системы. Мета-поисковые системы. Язык запросов поисковых систем. Российские поисковые системы и справочники. Международные поисковые системы и справочники. Их возможности и особенности работы. Международные и российские системы библиографического индексирования. Возможности и особенности работы систем ISI Web of Science, Scopus, ScholarGoogle, e-LIBRARY. Индекс Хирша. Импакт-фактор и квартиль журнала. Базы данных научной информации. Возможности и особенности баз данных NIST, COD, PDB, ChemBL. Системы EndNote, Mendeley, Zotero. Их возможности и особенности работы.

#### **4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся**

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

Электронные курсы, созданные в системе электронного обучения ННГУ:

Компьютерные технологии в науке и образовании, <https://e-learning.unn.ru/course/view.php?id=3592>.

Иные учебно-методические материалы:

-

#### **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:**

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.

### **5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Дискуссия) 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?

### **5.1.3 Типовые задания (оценочное средство - Дискуссия) 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?

### **Критерии оценивания (оценочное средство - Дискуссия)**

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Допустимый уровень знаний выше минимального. Продемонстрированы 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.

### **5.2. 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. 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	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 и несущественными 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 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 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 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



	<b>отлично</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	<b>очень хорошо</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	<b>хорошо</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	<b>удовлетворительно</b>	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»
<b>не зачтено</b>	<b>неудовлетворительно</b>	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	<b>плохо</b>	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

### 5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

#### 5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции УК-6

Почему возникает необходимость выработки специальных методов компьютерного представления химических структур

Что такое молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы?

Какие молекулярные визуализаторы и молекулярные редакторы вы знаете?

Задачи визуализации молекулярных поверхностей

Задачи визуального анализа молекулярных колебаний

Что такое генераторы конформаций, по каким принципам они работают?

#### 5.3.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ОПК-1

Особенности кодов ROSDAL, SMILES, SLN, InChi, InChiKeys

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, MOPAC, Gamess

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?

### 5.3.3 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ОПК-3

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?

### Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

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»

Оценка	Критерии оценивания
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»

## 6. 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. Мастрюкова, 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/>

## 7. 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 подготовки/специальности 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 28.09.2023 г, протокол № 1.