

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Костромской государственный университет»
(КГУ)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Направление подготовки 04.04.01 Химия

Направленность Физическая химия

Квалификация выпускника: магистр

**Кострома
2023**

Рабочая программа дисциплины «Компьютерные технологии» разработана в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования – магистратура по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденному приказом МИНОБРНАУКИ РОССИИ от 17 июля 2017 г. № 655.

Разработал: Кусманов Сергей Александрович, директор ИФМЕН, д-р. техн. наук, доцент

Рецензент: Хитрова Валентина Ивановна, заместитель директора ФГБУ государственная станция агрохимической службы «Костромская», руководитель испытательной лаборатории, канд. с.-х. наук

ПРОГРАММА УТВЕРЖДЕНА:

На заседании кафедры химии:

Протокол заседания кафедры № 8 от 07.04.2023 г.

Заведующий кафедрой химии Кусманова Ирина Александровна, канд.пед.наук, доцент

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цель дисциплины: формирование готовности к научно-исследовательской деятельности с применением компьютерных технологий.

Задачи дисциплины:

- сформировать представления о способах применения компьютерных технологий в профессиональной деятельности;
- сформировать готовность выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием программного обеспечения и баз данных профессионального назначения;
- сформировать способность использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины обучающийся должен освоить *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

ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач

ОПК-3: способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности

ОПК-3.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля

ОПК-3.2. Использует программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать:

- современные расчетно-теоретические методы химии;
- современные IT-технологии для сбора, анализа и представления информации химического профиля;
- программные продукты для решения задач профессиональной деятельности;
- современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

уметь:

- использовать современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач;
- использовать современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля;
- использовать программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности;
- использовать современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

владеть:

- навыками использования компьютерных технологий при решении профессиональных задач.

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Дисциплина «Компьютерные технологии» относится к обязательной части учебного плана. Изучается в 1 семестре обучения.

Изучение дисциплины является основой для освоения последующих дисциплин/практик: учебная (ознакомительная) практика.

Дисциплины и иные компоненты ОП, формирующие указанные выше компетенции:

- ОПК-1 (способность 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) формируется при освоении следующих дисциплин/практик: «Физико-химические методы исследования», «Компьютерные технологии»; учебная (ознакомительная) практика; защита выпускной квалификационной работы, включая подготовку к защите и процедуру защиты.

- ОПК-3 (способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности) формируется при освоении следующих дисциплин/практик: «Компьютерные технологии»; защита выпускной квалификационной работы, включая подготовку к защите и процедуру защиты.

4. Объем дисциплины (модуля)

4.1. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием академических часов и виды учебной работы

Виды учебной работы	Очная форма
Общая трудоемкость в зачетных единицах	7
Общая трудоемкость в часах	252
Аудиторные занятия в часах, в том числе:	84
Лекции	34
Практические занятия	50
Лабораторные занятия	-
Самостоятельная работа в часах	165,65
Форма промежуточной аттестации	Экзамен в 1 семестре (0,35) Консультация к экзамену (2 часа)

4.2. Объем контактной работы на 1 обучающегося

Виды учебных занятий	Очная форма
Лекции	34
Практические занятия	50
Лабораторные занятия	-
Консультации	2
Экзамен (1 семестр)	0,35
Курсовая работа	-
Всего	86,35

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам), с указанием количества часов и видов занятий

5.1 Тематический план учебной дисциплины

№ п/п	Название раздела, темы	Всего з.е/час	Аудиторные занятия		Самостоятельная работа
			Лекции	Практические	

1	Мир информации	0,17/6	2	-	4
2	Информационные технологии в обучении химии	2,11/76	12	16	48
3	Компьютерные технологии в научно-исследовательской деятельности	3,65/131,65	20	34	77,65
	Подготовка к экзамену	1/36	-	-	36
	ИКР (консультация к экзамену, экзамен)	0,065/2,35	-	-	-
Итого:		7/252	34	50	165,65

5.2. Содержание

ТЕМА 1. Мир информации

Информация: история и перспективы. Науковедение, наукометрия, информатика. Отечественные и зарубежные источники информации по химии. Совершенствование средств распространения, хранения, представления и обработки информации с развитием научно-технического прогресса. Типы аудио-, видеосредств и методология их применения. Современная компьютерная техника: структура, архитектура, основные характеристики. Понятие о мультимедиа. Современные средства телекоммуникаций и связи. Основные возможности. Главные области использования.

ТЕМА 2. Информационные технологии в обучении химии

Историческая справка. Развитие компьютерной техники и ее применение в обучении. Обучающая среда. Система преподаватель - студент. Компьютер, как средство обучения и восприятия. Роль преподавателя в процессе обучения с использованием компьютеров. Характеристики современных компьютеров, используемых в образовании. Тенденции и перспективы развития. Взаимодействие с пользователем. Программное обеспечение. Типы программ и их характеристика. Программы для обучающихся. Тренажеры. Обучающие программы. Компьютерное моделирование в обучении. Контролирующие программы. Программы проблемного подхода. Экспертные системы и искусственный интеллект. Программы специального назначения для преподавателя. Разработка обучающих программ. Проблемы и перспективы. Мультимедиа в обучении химии. Примеры программного обеспечения.

ТЕМА 3. Компьютерные технологии в научно-исследовательской деятельности

Компьютерное моделирование в химии и химической технологии. Основы моделирования и анализа химико-технологических процессов. Методы моделирования химических систем. Применение различных пакетов прикладных программ.

Программное обеспечение для обработки и анализа экспериментальных данных. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей.

Подготовка научной публикации по химии. Современные редакторы для химических текстов. Основные характеристики и возможности. Редактор структурных химических формул ISIS/Draw. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.

6. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

6.1. Самостоятельная работа обучающихся по дисциплине (модулю)

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Задание	Часы	Методические рекомендации по	Форма контроля
-------	--------------------------	---------	------	------------------------------	----------------

				выполнению задания	
1.	Мир информации	Проработка лекционного материала	4	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
2.	Информационные технологии в обучении химии	Проработка лекционного материала	18	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Разработка учебно-методического комплекса	30	Разработка методических материалов по заданию с помощью компьютерных технологий	Защита работы
3.	Компьютерные технологии в научно-исследовательской деятельности	Проработка лекционного материала	20	Обзор и анализ литературы	Устный опрос
		Подготовка графической информации для статьи	20	Построение анимации, графиков и диаграмм экспериментальных данных с помощью программного обеспечения	Защита работы
		Подготовка презентации научного доклада	10	Разработка презентации на основе результатов НИР или задания преподавателя	Защита работы
		Построение компьютерных моделей химических и химико-технологических процессов	27,65	Разработка компьютерных моделей химических и химико-технологических процессов на основе результатов НИР или по заданию преподавателя	Защита работы
	Подготовка к экзамену (контроль по плану)		36		Экзамен

6.2. Тематика и задания для практических занятий (при наличии)

1. Электронные документы. Программные средства для просмотра, создания электронных документов в формате DJVU, PDF, DOC. Презентации в MS Powerpoint. Основы языка HTML. Создание HTML-страниц.

Задание: Подготовить презентацию по простому методу молекулярных орбиталей.

2. Представление графической информации. Растровая и векторная графика. Стандартные средства для работы с графическими файлами. Средства обработки векторной и растровой графики. Импорт с различных носителей информации и экспорт графических изображений на различные носители информации. Основные методы и приемы цифровой обработки графических изображений. Виды компьютерной графики, их особенности, представление графических данных.

Задание: Работа с графическими редакторами.

3. Знакомство с обучающими программами, доступными через INTERNET. Электронные учебники по химии в сети.

Задание: Работа с электронным учебником «Открытая химия» и «Репетитор-химия».

4. Использование программы ISIS/Draw для представления структурных формул соединений, схем химических реакций, рисунков лабораторных химических установок.

Задание: Работа в программе ISIS/Draw для представления структурных формул соединений и схемы синтеза антипирина и анальгина.

5. Доступ к полнотекстовым электронным версиям периодических научных изданий по химии. Сервер eLibrary.ru. Работа с журналами издательств Elsevier, Springer, ACS.

Задание: На сервере eLibrary.ru проработать материалы по теме QSAR.

6. Работа с библиографическими базами данных. Тестовый он-лайн доступ к электронной версии реферативного журнала «Химия». Поля базы данных. Язык поисковых запросов.

Задание: Провести он-лайн поиск и составить базу данных по алифатическим спиртам.

7. Кодирование информации о структуре химических соединений. Программы визуализации структур молекул. Создание трехмерных моделей молекул и манипулирование ими. Способы задания координат атомов – декартовы координаты, Z-матрица.

Задания:

- Выполнить построение и анализ химической структуры ряда нейромедиаторов.

- Построить молекулярные структуры и 3D модели лекарственных препаратов.

Определить параметры структур.

8. Использование электронных таблиц для вычисления выборочных характеристик данных, проведения дисперсионного и регрессионного анализа. Печать документов. Дополнительные возможности программы.

Задания:

- Использование электронных таблиц Libre Office Calc для вычисления выборочных характеристик данных, проведения дисперсионного и регрессионного анализа в ряду алифатических спиртов.

- Использование электронных таблиц Libre Office Calc для вычисления выборочных характеристик данных, проведения дисперсионного и регрессионного анализа БА производных барбитуровой кислоты.

- Использование электронных таблиц Libre Office Calc для построения уравнений множественной линейной регрессии и анализа БА местных анестетиков.

- Использование электронных таблиц Libre Office Calc для построения уравнений множественной нелинейной регрессии и анализа БА антиэмитических препаратов.

9. Создание баз данных. Создание простых и сложных запросов. Преимущества работы с базами данных. Базы данных и их функции. Системы управления базами данных (СУБД Access). Создание таблиц для баз данных. Ввод данных в таблицы. Перепроектирование таблиц. Создание форм. Создание запросов. Создание отчетов. Агрегация с другими программными продуктами.

Задание: Создание баз данных по термодинамическим характеристикам метилзамещенных пиридина.

6.3. Тематика и задания для лабораторных занятий

Не предусмотрено

6.4. Методические рекомендации для выполнения курсовых работ

(проектов)

Не предусмотрено

7. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная

1. **Изюмов, А.А.** Компьютерные технологии в науке и образовании : учебное пособие / А.А. Изюмов, В.П. Коцубинский ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Томский Государственный Университет Систем Управления и Радиоэлектроники (ТУСУР). - Томск : Эль Контент, 2012. - 150 с. : ил.,табл., схем. - ISBN 978-5-4332-0024-1 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208648>
2. Современные компьютерные технологии : учебное пособие / Р.Г. Хисматов, Р.Г. Сафин, Д.В. Тунцев, Н.Ф. Тимербаев ; Министерство образования и науки России, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет». - Казань : Издательство КНИТУ, 2014. - 83 с. : схем. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-7882-1559-4 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=428016>
3. **Майстренко, А.В.** Информационные технологии поддержки инженерной и научно-образовательной деятельности / А.В. Майстренко, Н.В. Майстренко, И.В. Дидрих ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Тамбовский государственный технический университет». - Тамбов : , 2014. - 81 с. : схем., табл. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-8265-1373-6 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=277948>
4. **Онокой Л. С.** Компьютерные технологии в науке и образовании: Учебное пособие / Л.С. Онокой, В.М. Титов. - М.: ИД ФОРУМ: ИНФРА-М, 2011. - 224 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование). (переплет) ISBN 978-5-8199-0469-5 –**znanium.kom**

Дополнительная литература

1. Информационные технологии в образовании : учебное пособие / Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Северо-Кавказский федеральный университет», Министерство образования и науки Российской Федерации ; сост. В.В. Журавлев. - Ставрополь : СКФУ, 2014. - 102 с. : ил. - Библиогр. в кн. ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=457341>
2. **Диков, А.В.** Компьютерные технологии : учебное пособие / А.В. Диков. - Пенза : ПГПУ, 2005. - 306 с. : ил.,табл., схем. ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=96975>
3. **Марков, В.В.** Компьютерные технологии в науке и образовании : учеб. пособие. Ч. 1 / Марков, Владимир Васильевич, Ю. А. Кравченко ; Минобрнауки РФ [и др.]. - Таганрог : ТРТУ, 2006. - 133 с. - Библиогр.: с. 127-129. - 30.00.

4. **Соловьев, М. Е.** Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. - М. : СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Электронно-библиотечные системы:

- ЭБС Университетская библиотека онлайн, путь доступа <http://biblioclub.ru>;
- ЭБС «Znanium», путь доступа <http://znanium.com/>.

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

- Web of Science, путь доступа: <http://webofscience.com>;
- Scopus, путь доступа: <https://www.scopus.com>;
- РИНЦ, путь доступа: <https://elibrary.ru>;
- СПС КонсультантПлюс;
- ФГБУ «Президентская библиотека имени Б.Н. Ельцина»;
- Аннотированная библиографическая база данных журнальных статей MAPC.

9. Описание материально-технической базы, необходимой 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
Аудитория для занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Специализированная мебель; мультимедийный проектор; рабочее место преподавателя, оснащенное компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; экран переносной; доска меловая; учебно-наглядные пособия, обеспечивающие наглядные иллюстрации; наборы демонстрационного оборудования	Windows XP по лицензии OEM Software (поставщик ООО «Системный интегратор», договор № 22 ГК от 16.12.2016 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Аудитория для занятий семинарского типа (компьютерный класс), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации	Специализированная мебель; рабочие места; оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; рабочее место преподавателя; доска меловая	Windows Pro 8.1 (поставщик ООО Софт-лайт Проекты, договор №50155/ЯР4393 от 12.12.2014 г.); MathCAD Education (поставщик ООО ЮнитАльфаСофт, договор №208/13 от 10.06.2013 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Помещение для самостоятельной работы обучающихся	Специализированная мебель; рабочие места, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КГУ; демонстрационная LCD-панель; принтеры, в т.ч. большеформатный и цветной; сканеры (форматы А2 и А4); web-камеры; микрофоны	Windows XP по лицензии OEM Software (поставщик ООО «Системный интегратор», договор № 22 ГК от 16.12.2016 г.); АИБС «Марк-SQL» (поставщик НПО «Информ-система», договор № 260420060420 от 26.04.2006 г.); Свободно распространяемое программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
Помещение для самостоятельной работы обучающихся	Специализированная мебель; рабочие места, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа	Windows Pro 8.1 (поставщик ООО Софт-лайт Проекты, договор №50155/ЯР4393 от 12.12.2014 г.); Свободно распространяемое

	в электронную информационно-образовательную среду КГУ; доска меловая	программное обеспечение: LibreOffice (тип лицензии - GNU LGPL v3+)
--	--	--

Лист актуализации рабочей программы дисциплины

В рабочую программу дисциплины внесены следующие изменения:

1. обновлен перечень лицензионного программного обеспечения;
2. обновлен перечень основной и дополнительной литературы.