

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 11.09.2023 16:40:21
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
« 24 » декабря 2020 г.

Рабочая программа дисциплины
КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ
МОЛЕКУЛЯРНЫХ И ТВЕРДОФАЗНЫХ ВЕЩЕСТВ

Направление подготовки
18.03.01 Химическая технология
Направленность программы бакалавриата
Химическая технология материалов и изделий электроники и наноэлектроники

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет **Химии веществ и материалов**

Кафедра **Химической нанотехнологии и материалов электронной техники**

Санкт-Петербург

2020

Б1.В.ДВ.01.02

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Доцент		доцент С.Д.Дубровенский
Доцент		Е.О. Дроздов

Рабочая программа дисциплины «Компьютерные технологии в химии молекулярных и твердофазных веществ» обсуждена на заседании кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной техники

протокол от 15.12.2020 № 4

Заведующий кафедрой ХНиМЭТ

профессор А.А. Малыгин

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов

протокол от 17.12.2020 № 4

Председатель

доцент С.Г. Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель ООП «Химическая технология»		доцент М.В. Рутто
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	05
3. Объем дисциплины	05
4. Содержание дисциплины	06
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины	06
4.3. Занятия лекционного типа	07
4.4. Занятия семинарского типа.....	09
4.4.1. Семинары, практические занятия	09
4.4.2. Лабораторные занятия	09
4.5. Самостоятельная работа.....	09
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	10
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	10
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины	11
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	12
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	12
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	13
10.1. Информационные технологии	13
10.2. Программное обеспечение.....	13
10.3. Базы данных и информационные справочные системы	13
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	13
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	14
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	15

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Для освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ПК-4 Способен планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	ПК-4.3 Способность к использованию информационных технологий для моделирования молекулярных и твердотельных материалов, химических процессов и прогнозирования строения и свойства получаемых материалов	Знать: <ul style="list-style-type: none">- основные принципы формализации химической информации (ЗН-1).- организацию доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях (ЗН-2).- основные приемы практического построения квантово-химических, молекулярно-динамических и термодинамических моделей молекулярных и конденсированных сред (ЗН-3). Уметь: <ul style="list-style-type: none">- формализовать и кодировать химическую информацию (У-1).- формировать информационные запросы к химическим базам данных (У-2).- осуществлять поиск химической информации в сети Интернет (У-3).- анализировать результаты квантово-химических расчетов (У-4).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина "Компьютерные технологии в химии молекулярных и твердофазных веществ" относится к части Блока 1 «Дисциплины по выбору» образовательной программы бакалавриата, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.ДВ.01.02) и изучается на 4 году обучения в 7 семестре.

Изучение дисциплины базируется на знаниях и умениях, полученных при изучении курсов математики, физики, информатики, материаловедения.

Полученные в процессе освоения дисциплины знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе студента бакалавриата, а также при выполнении ВКР по тематике, связанной с разработкой и инновационным внедрением наукоемких процессов, материалов и технологий, созданием наноматериалов и разработкой нанотехнологических процессов.

3. Объем дисциплины

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц / академических часов)	4 / 144
Контактная работа с преподавателем:	58
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	36 (12)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	4
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	50
Формы текущего контроля	-
Форма промежуточной аттестации	экзамен (36)

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1	Химическая информация. Классификация программного обеспечения в области химических информационных технологий	2			10	ПК-4
2	Представление химической информации. Форматы структурно-химических данных	2	12			ПК-4
3	Визуализация структурно-химических данных	2	6		10	ПК-4
4	Химические базы данных и поиск химической информации во всемирной сети	4	6		10	ПК-4
5	Общие принципы моделирования молекул и твердых тел: квантовая химия, молекулярная динамика	4	12			ПК-4
6	Современные информационные технологии в кристаллографии и дифракционных методах анализа	2			10	ПК-4
7	Применение информационных технологий в спектральных методах анализа	2			10	ПК-4
ИТОГО		18	36		50	

4.2 Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ПК-4.3	Химическая информация. Классификация программного обеспечения в области химических информационных технологий Представление химической информации. Форматы структурно-химических данных Визуализация структурно-химических данных Химические базы данных и поиск химической информации во всемирной сети Общие принципы моделирования молекул и твердых тел: квантовая химия, молекулярная динамика Современные информационные технологии в кристаллографии и дифракционных методах анализа Применение информационных технологий в спектральных методах анализа

4.3. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<p>Химическая информация. Классификация программного обеспечения в области химических информационных технологий. Специфика химической информации. Организация доступа к химической информации. Локальные и глобальные компьютерные сети. Химические ресурсы в сети Интернет. Классификация информационных ресурсов и программного обеспечения в области химических информационных технологий (базы данных, средства моделирования и визуализации, идентификация химических объектов). Интеграция программного и информационного обеспечения.</p>	2	Лекция-беседа
2	<p>Представление химической информации. Форматы структурно-химических данных. Молекулярные форматы (xyz, mol, pdb, Z-матрица). Описание химических связей и зарядовых состояний. Представление химических реакций (msi, skc). Форматы описания твердых тел (cif, csd). Форматы представления поверхности твердых тел и каталитических процессов (cpd).</p>	2	Лекция-беседа
3	<p>Визуализация структурно-химических данных Двумерное (2D) и трехмерное (3D) представление. Представления двумерных структурных формул. Интерактивное конструирование химических структур. Химические 2D-редакторы. Средства трехмерной графики для визуализации химических данных. Способы 3D-представления химических объектов. Программы просмотра. Интеграция программного обеспечения в области визуализации и редактирования химических данных. Химический офис.</p>	2	Лекция-беседа
4	<p>Химические базы данных. Библиографические базы данных (Chemical Abstracts, Belstein). Универсальные базы физико-химических и структурных данных (Gmelin, Cambridge Soft, NIST). Специализированные базы данных по свойствам химических соединений (термодинамические, спектральные и т.д.).</p>	2	Лекция-беседа
	<p>Доступ к базам данных (on-line и off-line). Поиск и выборка химической информации. Основные принципы построения запроса к химическим базам данных. Оптимизация запроса. Проблема идентификации химических соединений в случае твердых тел. Интеграция СУБД и средств просмотра и редактирования.</p>	2	Лекция-беседа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
5	<p>Общие принципы моделирования молекул и твердых тел. Квантовая химия, молекулярная динамика, термодинамическое моделирование. Компьютерная химия как виртуальный эксперимент.</p> <p>Основные принципы практического построения квантово-химических моделей. Основные принципы построения заданий для квантово-химических расчетов и анализа их результатов (на примере GAMESS и Gaussian). Неэмпирические и полуэмпирические расчеты</p> <p>Задачи квантово-химического расчета и получаемая информация (энергия, структура, колебательные состояния и спектры, термодинамические потенциалы, оптические электронные спектры, переходные состояния, пути реакции). Квантово-химическое моделирование объема и поверхности твердых тел. Кластерный подход. Периодические граничные условия и модели кристаллических твердых тел. Сравнительный анализ квантово-химического программного обеспечения для молекулярно-кластерных расчетов.</p>	2	Лекция-беседа
6	<p>Современные информационные технологии в кристаллографии и дифракционных методах анализа. Компьютерная идентификация структуры и кристаллографические базы данных. Симуляция дифракционных данных и восстановление структуры. Определение эллипсоидов теплового смещения. Роль компьютерных технологий в интерпретации данных дифракционных методов исследования поверхности твердых тел (ДМЭ, EXAFS).</p>	2	Лекция-беседа
7	<p>Применение информационных технологий в спектральных методах анализа. Факторный анализ спектральных данных. Системы автоматической идентификации химических соединений. Интеграция современных методов анализа с использованием информационных технологий. Фурье-спектроскопия. Туннельно-зондовые методы анализа с точки зрения информационного обеспечения. Роль информационных технологий при спектральном исследовании поверхности твердых тел.</p>	2	Лекция-беседа

4.4. Занятия семинарского типа

4.4.1. Семинары, практические занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в т.ч. на практическую подготовку	
2	Компьютерный дизайн молекулярных соединений	6	2	
	Информационное представление и визуализация кристаллов	6	2	Компьютерное моделирование и практический анализ результатов
3	Поиск химических данных во всемирной компьютерной сети	6	2	Групповая научная дискуссия
4	Квантово-химическое моделирование электронной структуры кристаллов	6	2	Компьютерное моделирование и практический анализ результатов
5	Компьютерная обработка рентгенографических данных	6	2	
	Компьютерная обработка спектральных данных	6	2	Разбор конкретных ситуаций

4.4.2. Лабораторные занятия

Учебным планом не предусмотрены.

4.5. Самостоятельная работа обучающихся

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Общие принципы построения и классификация форматов данных. Текстовые и бинарные форматы. Открытые и закрытые форматы. Тегированные и фиксированные форматы. Информационная избыточность форматов данных. Преимущества и недостатки форматов разных типов.	10	контрольный опрос
3	Использование программных пакетов ChemOffice и ChemSketch для визуализации и обмена химическими данными	10	контрольный опрос
4	Поиск и выборка информации из химических баз данных с использованием графического интерфейса построения запросов	10	контрольный опрос
6	Моделирование результатов дифракционных исследований как средство производства химической информации	10	контрольный опрос
7	Компьютерные технологии в анализе веществ и материалов. Обработка спектральных данных	10	контрольный опрос

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

1. Дубровенский, С.Д. Компьютерный анализ спектральных данных / С.Д.Дубровенский. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 49 с. (ЭБ)
2. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 57 с. (ЭБ)
3. Дубровенский С.Д. Компьютерный дизайн и визуализация молекулярных объектов: практикум. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2016. - 16 с. (ЭБ)
4. Елисеев, А.А. Функциональные наноматериалы/ А.А.Елисеев, А.В.Лукашин; под ред. Ю.Д.Третьякова. – Москва: Физматлит, 2010. – 456 с. ISBN 978-5-9221-1120-1
5. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков. - Москва: Юрайт, 2010.– 555 с. ISBN 978-5-9916-0587-8 (ЭБ)
6. Романенко, В.Н. Работа в Интернете: от бытового до профессионального поиска: практическое пособие с примерами и упражнениями / В.Н.Романенко, Г.В.Никитина, В.С.Неверов. – Санкт-Петербург: Профессия, 2008. - ISBN 978-5-93913-121-6

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций. Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине – в конце 7 семестра в виде экзамена в устной форме. Экзамен предусматривает проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и включает 2 вопроса из различных тем пройденного материала. Время подготовки студента к устному ответу — до 30 мин.

Результаты экзамена включаются в приложение к диплому.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

Примеры вопросов, предлагаемых на экзамене:

1. Специфика химической информации. Идентификация молекулярных и твердотельных химических объектов. Роль структурной информации в химии.
2. Визуализация структурно-химических данных в виде двумерных структурных формул. Интерактивное конструирование химических структур. Химические 2D-редакторы.
3. Сравнительный анализ квантово-химического программного обеспечения для молекулярно-кластерных и периодических расчетов. Кросс-платформность и особенности интерфейса пользователя.
4. Термодинамическое моделирование процессов получения тонких пленок методами химического осаждения из газовой фазы. Модели образования индивидуальных и смешанных фаз. Термодинамические и кинетические модели химического осаждения тонких пленок.
5. Факторный анализ спектральных данных. Системы автоматической идентификации химических соединений.

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие / В.И. Барановский. - Москва: Academia, 2008. - 383 с. - ISBN 978-5-7695-3961-9
2. Гусев, А.И. Наноматериалы. Наноструктуры. Нанотехнологии / А.И.Гусев. - Москва: Физматлит, 2007. - 415 с. - ISBN 978-5-9221-0582-8
3. Дубровенский, С.Д. Компьютерный анализ спектральных данных / С.Д.Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 49 с.
4. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 57 с.
5. Дубровенский С.Д. Компьютерный дизайн и визуализация молекулярных объектов: практикум; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2016. - 16 с.
6. Елисеев, А.А. Функциональные наноматериалы / А.А.Елисеев, А.В.Лукашин; под ред. Ю.Д.Третьякова. – Москва: Физматлит, 2010. – 456 с. - ISBN 978-5-9221-1120-1
7. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков. - Москва: Юрайт, 2010.– 555 с. - ISBN 978-5-9916-0587-8
8. Мельников, В.П. Информационные технологии: учебник для вузов / В.П.Мельников. - Москва: Academia, 2008. - 425 с. - ISBN978-5-7695-3950-3
9. Рамбиди, Н.Г. Физические и химические основы нанотехнологий / Н.Г.Рамбиди, А.В. Березкин. - Москва: Физматлит, 2009.– 454 с. - ISBN 978-5-9221-0988-8
10. Суздаев, И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П.Суздаев. – Изд. 2-е испр. – Москва: Книжный дом «ЛИБРОМ», 2009. – 592 с. - ISBN 978-5-397-00217-2
11. Хрущева, И.В. Основы математической статистики и теории случайных процессов: Учебное пособие / И.В.Хрущева, В.И.Щербаков, Д.С.Леванова. – Санкт-Петербург: Изд-во «Лань», 2009. – 331 с. - ISBN 978-5-8114-0914-3

б) электронные издания:

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие / В.И. Барановский. – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар: Лань, 2019. - 428 с. ISBN 978-5-8114-3961-4 // Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: по подписке.
2. Дубровенский, С.Д. Компьютерный анализ спектральных данных / С.Д.Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 49 с. // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.
3. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам / С.Д.Дубровенский; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-

Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. - Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2011. – 57 с. // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.

4. Дубровенский С.Д. Компьютерный дизайн и визуализация молекулярных объектов: практикум; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химической нанотехнологии и материалов электронной техники. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2016. - 16 с. // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 15.12.2020). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины

1. Учебный план, РПД и учебно-методические материалы - media.technolog.edu.ru
2. ЭБ "Библиотех" СПбГТИ(ТУ) (доступ к сайту библиотеки);
3. Информационно-справочные поисковые системы и БД в сети Интернет; ЭБС «Лань»

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Все виды занятий по дисциплине проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

1. СТО СПбГТИ(ТУ) 026-2016. Положение о бакалавриате./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2016.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2016.- 38 с.
2. СТП СПбГТИ 040-02. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.07.2002.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2002.- 7 с.
3. СТО СПбГТИ(ТУ) 018-2014. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2014.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2014.- 16 с.
4. СТП СПбГТИ 048-2009. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2010.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2009.- 6 с.
5. СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. Порядок организации и проведения зачётов и экзаменов./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.06.2015. - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2015.- 45 с.

В ходе лекционных занятий студенту необходимо готовить конспект лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; пометать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Провести проверку терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь.

Аудиторная часть курса должна сопровождаться интенсивной самостоятельной работой студентов с рекомендованными преподавателями литературными источниками и информационными ресурсами сети Интернет по всем разделам дисциплины. Планирование времени для изучения дисциплины необходимо осуществлять на весь период обучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо в рамках внеаудиторной самостоятельной работы регулярно дополнять сведениями из литературных источников, приведенных в разделе 7 настоящей программы. При этом на основе изучения рекомендованной литературы целесообразно составить конспект основных положений, терминов и определений, требующих запоминания и необходимых для освоения следующих разделов учебной дисциплины. Для расширения и углубления знаний по учебной дисциплине необходимо активно использовать информационные ресурсы сети Интернет.

Для работы на практических занятиях необходимы: проработка рабочей программы, уделив особое внимание целям и задачам структуре и содержанию дисциплины, и конспектирование источников, а также изучение конспекта лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам и просмотр рекомендуемой литературы.

Промежуточная аттестация по дисциплине – в конце 7 семестра в виде экзамена в устной форме (включает 2 вопроса из различных тем пройденного материала). Результаты экзамена включаются в приложение к диплому.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций, видеоматериалов, виртуальных лабораторий и баз данных;
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

Представление лекционного материала и проведение практических занятий:

ОС – не ниже MS Windows XP SP3

MS PowerPoint 97 и выше

Проведение практических занятий:

Локальная сеть СПбГТИ(ТУ) (доступ к сайту библиотеки);

Программные пакеты:

ACDLabs, GAMESS, Gaussian, MathCAD

10.3. Базы данных и информационные справочные системы

1. ЭБ "Библиотех" СПбГТИ(ТУ) (доступ к сайту библиотеки);
2. Информационно-справочные поисковые системы и БД в сети Интернет; ЭБС «Лань»
3. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU <http://elibrary.ru>

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Реализация программы учебной дисциплины не предполагает наличия специализированного учебного кабинета при условии соответствия учебных кабинетов санитарным нормам, а его оборудования – изложенным ниже требованиям:

1. Учебная аудитория на 25 и более мест
2. Персональный компьютер.
3. Мультимедиа-проектор (разрешение не хуже 1024×758).
4. Стационарный или переносной проекционный экран.
5. Комплект презентаций и видеофильмов по дисциплине.

Практические занятия проводятся в учебном кабинете, отвечающем санитарным нормам, а его оборудование – следующим требованиям:

1. Учебная аудитория на 25 и более мест.
2. Персональные компьютеры для обучающихся.
3. Мультимедиа-проектор (разрешение не хуже 1024×758).
4. Стационарный или переносной проекционный экран.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, допущенные по медицинским показаниям к обучению по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, изучают дисциплину в полном объеме. Учебный процесс осуществляется в соответствии с "Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья ФГБОУ ВПО СПбГТИ(ТУ)", утвержденным ректором 28.08.2014.

Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине
"Компьютерные технологии в химии молекулярных и твердофазных веществ"

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-4	Способен планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК-4 Способность к использованию информационных технологий для моделирования молекулярных и твердотельных материалов, химических процессов и прогнозирования строения и свойства получаемых материалов	Знает основные принципы формализации химической информации (ЗН-1).	Правильные ответы на вопросы №№ 1-3 к экзамену	Приводит с ошибками и/или не в полной мере основные принципы формализации химической информации	Приводит с незначительными неточностями основные принципы формализации химической информации	Знает в полной мере основные принципы формализации химической информации
	Знает организацию доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях (ЗН-2).	Правильный ответ на вопрос № 9 к экзамену	Слабо ориентируется в организации доступа и поиске химической информации в компьютерных сетях	Описывает с незначительными неточностями организацию доступа и поиск химической информации в компьютерных сетях	Знает в полной мере организацию доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях
	Знает основные приемы практического построения квантово-химических, молекулярно-динамических и термодинамических моделей молекулярных и конденсированных сред (ЗН-3)	Правильные ответы на вопросы №№ 12-21 к экзамену	Слабо ориентируется в основных приемах практического построения квантово-химических, молекулярно-динамических и термодинамических моделей молекулярных и конденсированных сред	Приводит с незначительными неточностями основные приемы практического построения квантово-химических, молекулярно-динамических и термодинамических моделей молекулярных и конденсированных сред	Знает в полной мере основные приемы практического построения квантово-химических, молекулярно-динамических и термодинамических моделей молекулярных и конденсированных сред
	Умеет формализовать и кодировать химическую информацию (У-1).	Правильные ответы на вопросы №№ 4-8 к экзамену	Путается при формализации и кодировании химической информации	Умеет с незначительными ошибками формализовать и кодировать химическую информацию	Умеет в полной мере и без ошибок формализовать и кодировать химическую информацию

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Умеет формировать информационные запросы к химическим базам данных (У-2).	Правильный ответ на вопрос № 11 к экзамену	Путается при формировании информационных запросов к химическим базам данных	Умеет с небольшими подсказками преподавателя формировать информационные запросы к химическим базам данных	Уверенно формирует информационные запросы к химическим базам данных
	Умеет осуществлять поиск химической информации в сети Интернет (У-3).	Правильный ответ на вопрос № 10 к экзамену	Путается при поиске химической информации в сети Интернет	Умеет с небольшими подсказками преподавателя осуществлять поиск химической информации в сети Интернет	Уверенно осуществляет поиск химической информации в сети Интернет
	Умеет анализировать результаты квантово-химических расчетов (У-4).	Правильные ответы на вопросы №№ 22-27 к экзамену	Путается и допускает ошибки при анализе результатов квантово-химических расчетов	Умеет с небольшими подсказками преподавателя анализировать результаты квантово-химических расчетов	Уверенно и самостоятельно анализирует результаты квантово-химических расчетов

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ (ТУ): промежуточная аттестация проводится в форме **экзамена**. Критерии оценивания – «**удовлетворительно**», «**хорошо**», «**отлично**» приведены в таблице 2.

Оценка «отлично» ставится, если ответ студента отличается последовательностью, логикой изложения, учащийся демонстрирует глубину владения представленным материалом, ответы формулируются аргументировано, обосновывается собственная позиция в проблемных ситуациях.

Оценка «хорошо» ставится, если студент демонстрирует полное знание учебно-программного материала, показывает систематический характер знаний по дисциплине и способность к их самостоятельному пополнению и обновлению в ходе дальнейшей учебной работы и профессиональной деятельности, при этом в ответе возможны погрешности, самостоятельно устранимые студентом.

Оценка «удовлетворительно» ставится, если студент демонстрирует знания основного учебно-программного материала в объеме, минимально необходимом для дальнейшей учебы и предстоящей работы по специальности, при этом допускает погрешности в ответе на экзамене, но обладает знаниями для их устранения под руководством преподавателя

Оценка «неудовлетворительно» ставится, если ответ студента не передает содержание проблемы, не демонстрирует умение выделять главное, существенное, ответ носит краткий, неглубокий, поверхностный характер.

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-4

1. Специфика химической информации. Идентификация молекулярных и твердотельных химических объектов. Роль структурной информации в химии.
2. Организация доступа к химической информации в локальных и глобальных компьютерных сетях.
3. Классификация информационных ресурсов и программного обеспечения в области химических информационных технологий. Интеграция программного и информационного обеспечения.
4. Форматы структурно-химических данных. Молекулярные форматы (xyz, mol, pdb, Z-матрица). Описание химических связей и зарядовых состояний. Представление химических реакций (msi, skc).
5. Форматы описания твердых тел (cif, csd). Форматы представления поверхности твердых тел и каталитических процессов (cpd).
6. Визуализация структурно-химических данных. Двумерное (2D) и трехмерное (3D) представление.
7. Визуализация структурно-химических данных в виде двумерных структурных формул. Интерактивное конструирование химических структур. Химические 2D-редакторы.
8. Средства трехмерной графики для визуализации химических данных. Способы 3D-представления химических объектов. Программы просмотра.
9. Интеграция программного обеспечения в области визуализации и редактирования химических данных. Химический офис.
10. Химические базы данных .Библиографические базы химических данных данных. Универсальные базы физико-химических и структурных данных. Специализированные базы данных по свойствам химических соединений
11. Доступ к базам данных (on-line и off-line). Поиск и выборка химической информации. Основные принципы построения запроса к химическим базам данных. Оптимизация запроса. Интеграция СУБД и средств просмотра и редактирования.
12. Основные принципы практического построения квантово-химических моделей. Неэмпирические и полуэмпирические расчеты (уровень теории, атомный базис, электронная корреляция).
13. Квантово-химическое моделирование объема и поверхности твердых тел. Кластерный подход. Периодические граничные условия и модели кристаллических твердых тел.
14. Сравнительный анализ квантово-химического программного обеспечения для молекулярно-кластерных и периодических расчетов. Кросс-платформность и особенности интерфейса пользователя.
15. Задачи квантово-химического расчета и прогнозируемая информация.
16. Основные принципы построения заданий для квантово-химических расчетов и анализа их результатов.
17. Молекулярная динамика как средство моделирования термического поведения твердых тел. Фазовые переходы и полиморфные превращения. Сублимация и конденсация. Поверхностные явления.
18. Эмпирический характер молекулярно-динамических расчетов. Потенциалы межчастичного взаимодействия. Одно- и многоцентровые потенциалы. Проблемы динамического моделирования твердых фаз сложного состава. Квантово-молекулярная динамика.
19. Сравнительный анализ программного обеспечения для молекулярно-динамических расчетов. Основные принципы построения заданий для расчетов и анализа их результатов.
20. Термодинамическое моделирование процессов получения тонких пленок методами химического осаждения из газовой фазы. Модели образования индивидуальных и

- смешанных фаз. Термодинамические и кинетические модели химического осаждения тонких пленок.
21. Метод минимизации термодинамических потенциалов и метод констант равновесия. Модельные расчеты фазообразования в многокомпонентных системах. Прогноз термодинамического пути процесса и обход равновесия.
 22. Основы теории обработки сигналов: Отношение сигнал/шум и количество информации. Априорные знания и увеличение количества информации.
 23. Основы теории обработки сигналов: Оптимальная фильтрация. Аппаратная функция. Косвенные измерения.
 24. Компьютерная идентификация структуры и кристаллографические базы данных. Симуляция дифракционных данных и восстановление структуры. Определение эллипсоидов теплового смещения.
 25. Факторный анализ спектральных данных. Системы автоматической идентификации химических соединений.
 26. Интеграция современных методов анализа с использованием информационных технологий. Фурье-спектроскопия.
 27. Туннельно-зондовые методы анализа с точки зрения информационного обеспечения. Роль информационных технологий при спектральном исследовании поверхности твердых тел.

К экзамену допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче экзамена, студент получает 2 вопроса из перечня, приведенного выше.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

1. Положение о формах, периодичности и порядке проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в СПбГТИ(ТУ) (Утв. Приказом ректора СПбГТИ(ТУ) от 12.12.2014 № 463).

2. СТО СПбГТИ(ТУ) 026-2016. Положение о бакалавриате./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.01.2016.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2016.- 38 с.

3. СТО СПбГТИ(ТУ) 016-2015. Порядок организации и проведения зачётов и экзаменов./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.06.2015. - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2015.- 45 с.