

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Таюрский

» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

## Программа дисциплины

Компьютерные технологии в науке и образовании

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

## Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
  - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
  - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) старший научный сотрудник, к.н. (доцент) Новиков В.Б. (НИЛ Реологические и термохимические исследования, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Vladimir.Novikov@kpfu.ru

### 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-2	владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- ключевые концепции современных информационных технологий, как общих, так и специфических для области научных исследований
- назначение наиболее распространенных средств автоматизации информационной деятельности (текстовых процессоров, графических редакторов, электронных таблиц, баз данных, компьютерных сетей);
- принципы организации, порядок действий и эффективные методы работы с каждым пакетом, и способы получения дополнительных знаний о работе пакета;

Должен уметь:

- применять соответствующие программные продукты для обработки данных;
- эффективно решать с помощью изучаемого программного обеспечения исследовательские задачи, аналогичные учебным, а также самостоятельно применять полученные знания для решения новых задач;
- рационально проводить поиск и использование научно-технической информации с помощью компьютерных и сетевых технологий.

Должен владеть:

- применением изучаемого программного обеспечения для обработки, анализа и хранения данных.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- эффективно использовать телекоммуникационные технологии и, в частности, сервисы Интернет для получения релевантной информации по исследовательской тематике.

### 2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.Б.3 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к базовой (общепрофессиональной) части.

Осваивается на 1 курсе в 2 семестре.

### 3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) на 144 часа(ов).

Контактная работа - 44 часа(ов), в том числе лекции - 0 часа(ов), практические занятия - 44 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 100 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет во 2 семестре.

### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

#### 4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Тема 1. Обзор исследовательских задач, решаемых с помощью персональных компьютеров и основных пакетов программного обеспечения для их решения.	2	0	4	0	10
2.	Тема 2. Тема 2. Поиск научно технической информации в сети Интернет	2	0	4	0	10
3.	Тема 3. Тема 3. Системы управления библиографическими базами данных Reference Manager, EndNote, Mendeley, Zotero.	2	0	4	0	12
4.	Тема 4. Тема 4. Приложение Excel пакета MS Office	2	0	4	0	8
5.	Тема 5. Тема 5. Приложение Access пакета MS Office	2	0	4	0	10
6.	Тема 6. Тема 6. Пакет Origin	2	0	6	0	12
7.	Тема 7. Тема 7. Управление пакетами и автоматизация операций с помощью VBA	2	0	6	0	10
8.	Тема 8. Тема 8. Пакет MathCAD. Системы для графического ввода и рисования химических структур (ChemDraw, ISIS Draw), технологических схем (ChemCAD), системы автоматического проектирования (AutoCAD, КОМПАС 3D)	2	0	12	0	28
	Итого		0	44	0	100

#### 4.2 Содержание дисциплины (модуля)

##### **Тема 1. Тема 1. Обзор исследовательских задач, решаемых с помощью персональных компьютеров и основных пакетов программного обеспечения для их решения.**

Обзор исследовательских задач, решаемых с помощью персональных компьютеров (ПК) и основных пакетов программного обеспечения для их решения.

Особенности применения ПК и основные пакеты программного обеспечения, применяемые для обработки данных, хранения информации, представления результатов, численных инженерных расчетов, статистических расчетов. Организация работы пользователя на ПК.

##### **Тема 2. Тема 2. Поиск научно технической информации в сети Интернет**

Поиск научно технической информации в сети Интернет.

Наиболее общие принципы организации и функционирования глобальной компьютерной сети. Базы данных (БД) и системы управления базами данных (СУБД). Сетевые базы данных. Общие понятия о SQL.

##### **Тема 3. Тема 3. Системы управления библиографическими базами данных Reference Manager, EndNote, Mendeley, Zotero.**

Системы управления библиографическими базами данных Reference Manager, EndNote, Mendeley, Zotero.

Библиографические менеджеры Reference Manager, EndNote, как средство создания собственных библиографических БД. Интергация этих программных продуктов с онлайн-поисковыми системами и каталогами библиотек.

##### **Тема 4. Тема 4. Приложение Excel пакета MS Office**

Приложение Excel пакета MS Office.

Обзор решаемых с помощью приложения задач; Структуры и типы данных, функции приложения; Работа с ячейками, листами и книгами; Построение 2D графиков и гистограмм; Редактирование 2D графиков: оси, подписи, работа с цветом, расположение графиков;

#### **Тема 5. Тема 5. Приложение Access пакета MS Office**

Приложение Access пакета MS Office.

Обзор решаемых с помощью приложения задач; Структуры и типы данных, функции приложения; Работа с таблицами и запросами; Построение форм ввода и вывода информации; Принципы организации реляционных баз данных, построение индексов и связей между таблицами и запросами;

#### **Тема 6. Тема 6. Пакет Origin**

Пакет Origin.

Работа с таблицами; Построение 2D графиков и гистограмм; Редактирование 2D графиков: оси, подписи, работа с цветом; Работа со слоями: расположение графиков; Пример аппроксимации данных аналитическими функциями;

#### **Тема 7. Тема 7. Управление пакетами и автоматизация операций с помощью VBA**

Управление пакетами и автоматизация операций с помощью VBA.

Общие понятия о технологическом стандарте COM (Component Object Model) и одном из инструментов его реализации ? VBA. Обзор решаемых с помощью VBA задач: межпакетный обмен данными, управление и автоматизация решения задач; Структуры и типы данных,

#### **Тема 8. Тема 8. Пакет MathCAD. Системы для графического ввода и рисования химических структур (ChemDraw, ISIS Draw), технологических схем (ChemCAD), системы автоматического проектирования (AutoCAD, КОМПАС 3D)**

Пакет MathCAD.

Простые вычисления; Вычисления с размерными величинами; Структуры данных: вектора, матрицы, диапазоны; Функции и итерационные вычисления; Аналитические преобразования;

Системы для графического ввода и рисования химических структур (ChemDraw, ISIS Draw), технологических схем (ChemCAD), системы автоматического проектирования (AutoCAD, КОМПАС 3D).

Создание и редактирование химических структур. Средства для проверки химических формул и структур. Конвертация названия соединения в структуру и обратное название соединения по структуре (ИЮПАК). Симуляция ЯМР-спектров. Шаблоны распространенных макроструктур и оборудования. Возможности взаимодействия пакетов ChemDraw и Excel. Состав интегрированного пакета Chem Office, назначение и возможности его компонентов.

### **5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)**

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

### **6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)**

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
  - критерии оценивания сформированности компетенций;
  - механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
  - описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
  - критерии оценивания для каждого оценочного средства;
  - содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.
- Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

## **7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

## **8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

- MathCAD - программно - интегрированная среда - <http://portal.tpu.ru/SHARED/i/ISAEV/Job/Tab1/KompTex1.pdf>  
Компьютерные технологии в науке и образовании - <http://chaliev.ru/ise/lections-comp-tech-zo.php>  
Обзор Microsoft Excel - <http://office.microsoft.com/ru-ru/excel>  
Официальный сайт ChemOffice - <http://www.cambridgesoft.com/software/ChemOffice>  
Химическая информация и обучение ее поиску - <http://www.chem.msu.su/rus/vmgu/00add/009/>

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Методические указания к выполнению контрольных работ

К выполнению контрольных работ рекомендуется приступать только после усвоения необходимого учебного материала дисциплины. Задания на контрольные работы разрабатываются в нескольких вариантах.

Рекомендации по освоению контрольных работ:

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;
- ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений;
- решения задачи работы необходимо представлять вместе со всеми промежуточными преобразованиями и ссылками на используемые справочные материалы;
- при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат;
- не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких - либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине;
- неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы;
- на каждой странице работы необходимо оставлять поля на каждой странице работы необходимо оставлять поля;

- в шапке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, группу, направление и профиль, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания.

#### **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

#### **11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

#### **12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья**

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Хемоинформатика и молекулярное моделирование".

Приложение 2  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.Б.3 Компьютерные технологии в науке и образовании

**Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

**Основная литература:**

1. Тарасевич, Юрий Юрьевич. Математическое и компьютерное моделирование: вводный курс: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности 030100 'Информатика' / Ю. Ю. Тарасевич. Изд. 6-е. Москва: URSS: [ЛИБРОКОМ, 2013].
2. Тарасевич, Юрий Юрьевич. Математическое и компьютерное моделирование : вводный курс : учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности 030100 'Информатика' / Ю. Ю. Тарасевич. Изд. 5-е. Москва : URSS : [ЛИБРОКОМ, 2012].
3. Компьютерные технологии в науке и образовании: Учебное пособие / Л.С. Онокой, В.М. Титов. - М.: ИД ФОРУМ: ИНФРА-М, 2011. - 224 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=241862> ЭР
4. Насибуллов, Р.Р. Информационные технологии в профессиональной деятельности: Конспект лекций / Насибуллов Р.Р. Казанский (Приволжский) федеральный университет.- Казань, 2013. - 58 с. [http://libweb.ksu.ru/ebooks/20-IPO/20\\_217\\_A5kl-000531.pdf](http://libweb.ksu.ru/ebooks/20-IPO/20_217_A5kl-000531.pdf)

**Дополнительная литература:**

1. Федотова Е. Л. Информационные технологии в науке и образовании: Учебное пособие / Е.Л. Федотова, А.А. Федотов. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 336 с // <http://znanium.com/bookread.php?book=411182>
2. Трайнев, В. А. Новые информационные коммуникационные технологии в образовании [Электронный ресурс] / В. А. Трайнев, В. Ю. Теплышев, И. В. Трайнев. - 2-е изд. - М. : Издательско-торговая корпорация 'Дашков и К-', 2013. - 320 с. // <http://znanium.com/bookread.php?book=430429>
3. Быкова, В. В. Искусство создания базы данных в Microsoft Office Access 2007 [Электронный ресурс] : Учеб. пособие / В. В. Быкова. - Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2011. - 260 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=443138>



Приложение 3  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.Б.3 Компьютерные технологии в науке и образовании

**Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2016

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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, учебно-методические комплексы, 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 ВО) нового поколения.