

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



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Минзарипов Р.Г.

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**

Компьютерные технологии в науке и образовании М1.Б.3

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Новиков В.Б.

**Рецензент(ы):**

Галкин В.И.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Соломонов Б. Н.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2013

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Новиков В.Б. Кафедра физической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Vladimir.Novikov@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

-формирование глубленных знаний современных информационных технологий, развитие информационной культуры, подготовка к профессиональной деятельности в сфере науки и образования.

- ознакомление с возможностями современных персональных компьютеров и специализированных пакетов программного обеспечения, как инструментов обработки экспериментальных данных, математического моделирования и анализа изучаемых процессов, хранения и обработки больших объёмов информации, использования локальных компьютерных сетей и сети Интернет для поиска научно-технической информации

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М1.Б.3 Общенаучный" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

цикл М.1 общенаучных дисциплин, базовой части М1.Б.3. Опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: высшая математика, информатика (информационные технологии).

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-5 (общекультурные компетенции)	способностью понимать сущность и значение информации в развитии современного информационного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способностью использовать нормативные правовые документы в своей деятельности, проявлять настойчивость в достижении цели с учетом моральных и правовых норм и обязанностей

В результате освоения дисциплины студент:

1. 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;

2. 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.

3. должен владеть:

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

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

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

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

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Обзор исследовательских задач, решаемых с помощью персональных компьютеров и основных пакетов программного обеспечения для их решения.	2	1-2	0	4	0	
2.	Тема 2. Поиск научно технической информации в сети Интернет	2	3-4	0	6	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
3.	Тема 3. Системы управления библиографическими базами данных Reference Manager, EndNote, Mendeley, Zotero.	2	5-6	0	8	0	контрольная работа
4.	Тема 4. Приложение Excel пакета MS Office	2	7-8	0	6	0	
5.	Тема 5. Приложение Access пакета MS Office	2	9	0	4	0	контрольная работа
6.	Тема 6. Пакет Origin	2	10-11	0	6	0	
7.	Тема 7. Управление пакетами и автоматизация операций с помощью VBA	2	12-14	0	6	0	
8.	Тема 8. Пакет MathCAD	2	15-16	0	8	0	
9.	Тема 9. Системы для графического ввода и рисования химических структур (ChemDraw, ISIS Draw), технологических схем (ChemCAD), системы автоматического проектирования (AutoCAD, КОМПАС 3D)	2	17-18	0	8	0	контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	зачет
	Итого			0	56	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

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

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

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. Поиск научно технической информации в сети Интернет**

**практическое занятие (6 часа(ов)):**

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

#### ***практическое занятие (8 часа(ов)):***

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. Приложение Excel пакета MS Office**

#### ***практическое занятие (6 часа(ов)):***

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. Приложение Access пакета MS Office**

#### ***практическое занятие (4 часа(ов)):***

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. Пакет Origin**

#### ***практическое занятие (6 часа(ов)):***

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. Управление пакетами и автоматизация операций с помощью VBA**

#### ***практическое занятие (6 часа(ов)):***

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. Пакет MathCAD**

#### ***практическое занятие (8 часа(ов)):***

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

### **Тема 9. Системы для графического ввода и рисования химических структур (ChemDraw, ISIS Draw), технологических схем (ChemCAD), системы автоматического проектирования (AutoCAD, КОМПАС 3D)**

#### ***практическое занятие (8 часа(ов)):***

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.

## **4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Обзор исследовательских задач, решаемых с помощью персональных компьютеров и основных пакетов программного обеспечения для их решения.	2	1-2	самостоятельная проработка информации	8	опрос
2.	Тема 2. Поиск научно технической информации в сети Интернет	2	3-4	самостоятельная проработка информации	8	опрос
3.	Тема 3. Системы управления библиографическими базами данных Reference Manager, EndNote, Mendeley, Zotero.	2	5-6	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа
4.	Тема 4. Приложение Excel пакета MS Office	2	7-8	самостоятельная проработка информации	6	опрос
5.	Тема 5. Приложение Access пакета MS Office	2	9	подготовка к контрольной работе	8	контрольная работа
6.	Тема 6. Пакет Origin	2	10-11	самостоятельная проработка информации	12	опрос
7.	Тема 7. Управление пакетами и автоматизация операций с помощью VBA	2	12-14	самостоятельная проработка информации	8	опрос
8.	Тема 8. Пакет MathCAD	2	15-16	самостоятельная проработка информации	14	опрос
9.	Тема 9. Системы для графического ввода и рисования химических структур (ChemDraw, ISIS Draw), технологических схем (ChemCAD), системы автоматического проектирования (AutoCAD, КОМПАС 3D)	2	17-18	подготовка к контрольной работе	14	контрольная работа
	Итого				88	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- практические занятия проводятся в компьютерном классе, подключенном к сети Интернет

## **6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

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

опрос , примерные вопросы:

Провести поиск в библиографических базах всех публикаций в периодических изданиях за последние 5 (варианты) лет Иванова И.И. (варианты), относящиеся к металлокомплексному катализу (варианты). Данные представить в формате, принятом для цитирования в Journal of the American Chemical Society (варианты).

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

опрос , примерные вопросы:

Приведите список 5 авторов наиболее активно публикующихся в области металло-комплексного катализа (варианты).

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

контрольная работа , примерные вопросы:

Приведите 10 наиболее часто цитируемых публикаций за период 1995-200 годы (варианты) российских авторов, относящихся к металлокомплексному катализу (варианты). Список представить в формате, принятом для цитирования в Journal of the American Chemical Society (варианты).

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

опрос , примерные вопросы:

Приведите список 10 научных центров (организаций от имени которых опубликованы научные исследования) наиболее активно публикующих работы по теме металлокомплексный катализ (варианты).

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

контрольная работа , примерные вопросы:

Дана функция:  $Y=A+B \cdot X+C \cdot X^2$ . Построить график этой функции в интервале от  $X=X_1$  до  $X=X_2$  (значения A, B, C,  $X_1$ ,  $X_2$  варьируются).

### **Тема 6. Пакет Origin**

опрос , примерные вопросы:

Задан массив из 100 пар значений X, Y. Найти параметры зависимости Y от X в трех вариантах (полиномы первой и второй степени, а также экспоненциальная зависимость  $Y=A \cdot \exp[B \cdot X]$ ) с помощью инструмента Excel: Поиск решения. Сопоставить полученные результаты, используя анализ регрессионных остатков, а в качестве количественного критерия - стандартное отклонение рассчитанных значений от экспериментально определенных.

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

опрос , примерные вопросы:

Обсуждение: 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, Объекты, формы, модули, процедуры, функции. Синтаксис языка. Пример автоматизации вычислений в Excel.

### **Тема 8. Пакет MathCAD**

опрос , примерные вопросы:



Обсуждение Простые вычисления; Вычисления с размерными величинами; Структуры данных: вектора, матрицы, диапазоны: Функции и итерационные вычисления; Аналитические преобразования; Графики: 2D, 3D, гистограммы; Функции пакета MathCad; Пример численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

### **Тема 9. Системы для графического ввода и рисования химических структур (ChemDraw, ISIS Draw), технологических схем (ChemCAD), системы автоматического проектирования (AutoCAD, КОМПАС 3D)**

контрольная работа , примерные вопросы:

1. Кинетика реакций первого порядка. Задан массив из 30 пар значений X, Y (в файле Excel). Известно, что переменные X и Y связаны друг с другом соотношением:  $Y=A \cdot \exp[B \cdot X]$ . Построить с помощью пакета Origin графики зависимостей Y - X и  $\ln(Y) ? X$ . Найти значения коэффициентов A и B, а также доверительные интервалы для них. 2. Энергия активации. График Вант-Гоффа. Задан массив из 30 пар значений X, Y (в файле Excel). Известно, что переменные X и Y связаны друг с другом соотношением:  $Y=A \cdot \exp[B/X]$ . Построить с помощью пакета Origin графики зависимостей Y - X и  $\ln(Y) ? 1/X$ . Найти значения коэффициентов A и B, а также доверительные интервалы для них.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Примерные задания к контрольной работе ♦ 1

1. Провести поиск в библиографических базах всех публикаций в периодических изданиях за последние 5 (варианты) лет Иванова И.И. (варианты), относящиеся к металлокомплексному катализу (варианты). Данные представить в формате, принятом для цитирования в Journal of the American Chemical Society (варианты).

2. Приведите список 5 авторов наиболее активно публикующихся в области металлокомплексного катализа (варианты).

3. Приведите 10 наиболее часто цитируемых публикаций за период 1995-200 годы (варианты) российских авторов, относящихся к металлокомплексному катализу (варианты). Список представить в формате, принятом для цитирования в Journal of the American Chemical Society (варианты).

4. Приведите список 10 научных центров (организаций от имени которых опубликованы научные исследования) наиболее активно публикующих работы по теме металлокомплексный катализ (варианты).

Примерные задания к контрольной работе ♦ 2

1. Дана функция:  $Y=A+B \cdot X+C \cdot X^2$ . Построить график этой функции в интервале от  $X=X_1$  до  $X=X_2$  (значения A, B, C,  $X_1$ ,  $X_2$  варьируются).

2. Задан массив из 100 пар значений X, Y. Найти параметры зависимости Y от X в трех вариантах (полиномы первой и второй степени, а также экспоненциальная зависимость  $Y=A \cdot \exp[B \cdot X]$ ) с помощью инструмента Excel: "Поиск решения?". Сопоставить полученные результаты, используя анализ регрессионных остатков, а в качестве количественного критерия - стандартное отклонение рассчитанных значений от экспериментально определенных.

Примерные задания к контрольной работе ♦ 3

1. Кинетика реакций первого порядка. Задан массив из 30 пар значений X, Y (в файле Excel). Известно, что переменные X и Y связаны друг с другом соотношением:  $Y=A \cdot \exp[B \cdot X]$ . Построить с помощью пакета Origin графики зависимостей Y - X и  $\ln(Y) - X$ . Найти значения коэффициентов A и B, а также доверительные интервалы для них.

2. Энергия активации. График Вант-Гоффа. Задан массив из 30 пар значений X, Y (в файле Excel). Известно, что переменные X и Y связаны друг с другом соотношением:  $Y=A \cdot \exp[B/X]$ . Построить с помощью пакета Origin графики зависимостей Y - X и  $\ln(Y) - 1/X$ . Найти значения коэффициентов A и B, а также доверительные интервалы для них.

### **7.1. Основная литература:**

1. Рагойша А.А. Поиск химической информации в Интернет: научные публикации. Минск: БГУ, 2007.- 74 с.
2. Abha Agrawal. EndNote 1 - 2 - 3 Easy!: Reference Management for the Professional N.-Y.: Springer,2009.- 296 p.
3. Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю., Юзюк Ю.И. Обработка и визуализация данных физиче-ских экспериментов с помощью пакета Origin - М: Книжный дом "ЛИБКОМ", 2009. - 136 с.

### **7.2. Дополнительная литература:**

1. Майкл Грох, Джозеф Стокман, Гэвин Пауэлл Microsoft Office Access 2007. Библия пользователя = Microsoft Office Access 2007 Bible ? М.: "Диалектика", 2008. ? С. 1200
2. Дьяконов В. П., Абраменкова И. В. Mathcad 8 в математике, в физике и в Internet. М.: Нолидж.- 1999-512 с
3. Гайдышев И.П. Решение научных и инженерных задач средствами Excel, VBA и C/C++ С.П-б.:БХВ-Петербург, 2004.- 504 с.
4. Гандерлой М., Харкинз С.С Автоматизация Microsoft Access с помощью VBA - М.: Издательский дом "Вильямс", 2006. - 409 с.

### **7.3. Интернет-ресурсы:**

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 ChemOfficehttp - <http://www.cambridgesoft.com/software/ChemOffice/>

Химическая информация и обучение ее поиску - <http://www.chem.msu.su/rus/vmgu/00add/009/>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану**

Освоение дисциплины "Компьютерные технологии в науке и образовании" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .

Автор(ы):

Новиков В.Б. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Галкин В.И. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Лист согласования

<b>N</b>	<b>ФИО</b>	<b>Согласование</b>
1	Соломонов Б. Н.	Согласовано
2	Антипин И. С.	
3	Бычкова Т. И.	
4	Чижанова Е. А.	
5	Соколова Е. А.	
6	Тимофеева О. А.	