

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 12.09.2021 20:34:46
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84

**Рабочая программа дисциплины
ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В ТВЕРДОТЕЛЬНОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

Направление подготовки

18.03.01 Химическая технология

Направленность образовательной программы

Химическая технология неорганических веществ

Профессиональный модуль

Химическая технология материалов и изделий электроники и нанoeлектроники

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчик		доцент С.Д.Дубровенский

Рабочая программа дисциплины «Информационные технологии в твердотельном материаловедении» обсуждена на заседании кафедры химической нанотехнологии и материалов электронной техники

протокол от 02.12.2016 № 3

Заведующий кафедрой

А.А.Малыгин

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов

протокол от 2016 №

Председатель

С.Г.Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химическая технология» (неорганических веществ)		профессор А.А.Малыгин
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. Занятия лекционного типа.....	06
4.3. Занятия семинарского типа.....	08
4.3.1. Семинары, практические занятия	08
4.3.2. Лабораторные занятия.....	08
4.4. Самостоятельная работа.....	09
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	09
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	09
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	10
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	11
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	11
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	12
10.1. Информационные технологии.....	12
10.2. Программное обеспечение.....	12
10.3. Информационные справочные системы.....	12
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	12
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	12
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации....	13

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

Для получения планируемых результатов освоения образовательной программы магистратуры обучающийся в соответствии с ФГОС ВО по направлению "Химическая технология" (18.03.01) (Утв. Приказом Минобрнауки России от 11.08.2016 № 1005) должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Коды компетенции	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОПК-3	Готовность использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - способы теоретического прогнозирования химических и физических свойств химических соединений <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формализовать и кодировать химическую информацию <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - компьютерными средствами обработки спектральных данных
ПК-2	Готовность применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - основные принципы формализации химической информации - основные принципы моделирования химических объектов и прогнозирования их свойств <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - визуализировать химическую информацию - осуществлять построение и анализ компьютерных моделей - основные принципы повышения информативности физико-химических методов анализа материалов <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - программными средствами визуализации и анализа химических объектов - приемами практического моделирования молекулярных и конденсированных сред
ПК-20	Готовность изучать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования	<p>Знать</p> <ul style="list-style-type: none"> - способы организации доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - формировать информационные запросы к химическим базам данных - осуществлять поиск химической информации в сети Интернет <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - приемами компьютерного дизайна молекулярных и кристаллических материалов

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к профессиональному модулю по выбору Б1.В.ДВ.03.03. «Химическая технология материалов и изделий электроники и наноэлектроники», является обязательной (Б1.В.ДВ.03.03.05) и изучается на 4 курсе обучения в 7 семестре.

Изучение дисциплины базируется на знаниях и умениях, полученных при изучении курсов "Общая и неорганическая химия", "Физика", "Математика", "Материаловедение", "Информатика".

Компетенции, приобретенные в результате освоения дисциплины, будут использованы при выполнении и защите выпускной квалификационной работы, при решении научно-исследовательских, проектно-конструкторских, производственно-технологических задач.

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:	60
занятия лекционного типа	18
занятия семинарского типа, в т.ч.	36
семинары, практические занятия	-
лабораторные работы	36
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	6
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	57
Формы текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	зачет, экзамен (27)

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1	Специфика информационных технологий в химии веществ и материалов	2			10	ОПК-3
2	Форматы данных и представление химической информации	4		12	12	ПК-2
3	Поиск и обработка химической информации	4		6	12	ПК-20
4	Использование информационных технологий для прогнозирования свойств химических объектов	4		6	12	ПК-2
5	Компьютерные технологии в анализе веществ и материалов	4		12	11	ПК-2

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	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.	2	Лекция-беседа
2	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).	2	Лекция-беседа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	<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
3	<p>Химические базы данных и поиск химической информации во всемирной сети. 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 и обработка информации. 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
4	<p>Общие принципы моделирования молекул и твердых тел. Квантовая химия, молекулярная динамика, термодинамическое моделирование. Компьютерная химия как виртуальный эксперимент. 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>	2	Лекция-беседа
	<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

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
5	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).	2	Лекция-беседа
	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.	2	Лекция-беседа

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия

Учебным планом не предусмотрены.

4.3.2. Лабораторные занятия

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

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Форматы данных и представление химической информации Визуализация биологических объектов	10	контрольный опрос
2	Поиск и обработка химической информации. Оценка индекса цитирования автора по библиографической базе данных E-library	12	контрольный опрос
3	Использование информационных технологий для прогнозирования свойств химических объектов	12	контрольный опрос
4	Анализ областей применения методов моделирования веществ и материалов	12	контрольный опрос
5	Компьютерные технологии в анализе веществ и материалов Обработка спектральных данных	11	контрольный опрос

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

1. Дубровенский, С.Д. Компьютерный анализ спектральных данных./ С.Д. Дубровенский.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011.– 49 с.
2. Дубровенский, С.Д. Квантово-химический анализ продуктов химического модифицирования поверхности кремнезема: методические указания к лабораторным работам/ С.Д.Дубровенский.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011.– 60 с
3. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков.- М.: Юрайт, 2010. – 555 с.
4. 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.- СПб.: Профессия, 2008.- 416 с.
5. Елисеев, А.А. Функциональные наноматериалы/ А.А. Елисеев, А.В. Лукашин; под ред. Ю.Д.Третьякова.– М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.– 456 с.

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 («зачтено») 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 зачета и экзамена в устной форме. Зачет предусматривает защиту выполненных расчетных заданий. 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 зачета включаются в приложение к диплому.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

Примеры вопросов, предлагаемых на экзамене:

1. Специфика информационных технологий в области химии и материаловедения. Структурирование химической информации. Роль библиографических данных в химии.
2. Способы идентификации молекулярных и твердотельных химических объектов. Роль структурной информации в химии.
3. Средства трехмерной графики для визуализации химических данных. Операции проектирования. Аппаратная поддержка 3D-визуализации.
4. Визуализация молекулярных объектов. Способы и стили 3D-представления атомов и химических связей. Мониторинг структурных параметров. Использование текста в 3D-графике: метки атомов, структурные характеристики. Программное обеспечение для 3D-визуализации (просмотра) молекулярных данных.
5. Интеграция программного обеспечения в области визуализации и редактирования химических данных. Программные средства интеграции. Химический офис.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

Основная литература.

1. Дубровенский, С.Д. Компьютерный анализ спектральных данных./ С.Д. Дубровенский.- СПб.: 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.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011.– 60 с. (ЭБ)
3. Елисеев, А.А. Функциональные наноматериалы/ А.А.Елисеев, А.В.Лукашин; под ред. Ю.Д.Третьякова.– М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.– 452 с.
4. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков.- М.: Юрайт, 2010.– 555 с.
5. Хрущева, И.В. Основы математической статистики и теории случайных процессов: Учебное пособие / И.В.Хрущева, В.И.Щербаков, Д.С.Леванова – СПб.: Изд-во «Лань», 2009.– 331 с.

Дополнительная литература.

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов по химическим спец. / В.И. Барановский.- М.: Academia, 2008.- 383 с.
2. Гусев, А.И. Наноматериалы. Наноструктуры. Нанотехнологии / А.И.Гусев.- М.: Физматлит, 2009.- 415 с.
3. Мельников, В.П. Информационные технологии: учебник для вузов/ В.П.Мельников.- М.: Academia, 2008.- 425 с.
4. Рамбиди, Н.Г. Физические и химические основы нанотехнологий/ Н.Г.Рамбиди, А.В. Березкин.- М.: Физматлит, 2009.– 454 с.
5. 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.- СПб.: Профессия, 2008.- 416 с.
6. Суздаев, И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов/ И.П.Суздаев.- Изд 2-е испр.– М.: ЛИБРОКОМ, 2009.– 592 с.

Вспомогательная литература.

1. Алесковский, В.Б. Курс химии надмолекулярных соединений: учебное пособие / В.Б.Алесковский.- Л.: ЛГУ, 1990.- 284 с.
2. Алесковский, В.Б. Химия надмолекулярных соединений / В.Б.Алесковский.- СПб.: СПбГУ, 1996.- 256 с.
3. Алехин, А.П. Физико-химические основы субмикронной технологии./А.П. Алехин. – М.: МФТИ, 1996. – 178 с.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», 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;

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) 020-2011. Виды учебных занятий. Лабораторные работы. Общие требования к организации и проведению занятий./ СПбГТИ(ТУ).- Введ. с 01.07.2011.- СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011.- 21 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 магистранту 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 магистрантов 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 зачета и экзамена (оба - в устной форме). Зачет предусматривает защиту расчетных контрольных заданий. Экзамен включает 2 вопроса из различных тем пройденного материала. Время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин. Результаты зачета и экзамена включаются в приложение к диплому.

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

10.1. Информационные технологии.

Чтение лекций с использованием слайд-презентаций, видеоматериалов, виртуальных лабораторий и баз данных.

10.2. Программное обеспечение.

Представление лекционного материала:

ОС – не ниже MS Windows XP SP3

MS PowerPoint 97 и выше

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

Программные пакеты:

ACDLabs, GAMESS, Gaussian, MathCAD

10.3. Информационные справочные системы.

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.

Лабораторные 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 18.04.01 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
«Информационные технологии в твердотельном материаловедении»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Компетенция		
Индекс	Формулировка	Этап формирования
ОПК-3	Готовность использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире	промежуточный
ПК-2	Готовность применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования	промежуточный
ПК-20	Готовность изучать научно-техническую информацию, отечественный и зарубежный опыт по тематике исследования	промежуточный

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

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 1	Знает специфику информационных технологий в химии веществ и материалов	Правильный ответ на вопрос №№ 1-3	ОПК-3
Освоение раздела № 2	Знает форматы данных и представление химической информации	Правильные ответы на вопросы №№ 4-16	ПК-2
Освоение раздела № 3	Владеет поиском и обработкой химической информации	Правильные ответы на вопросы №№ 28-36	ПК-20
Освоение раздела № 4	Умеет использовать информационные технологии для прогнозирования свойств химических объектов	Правильные ответы на вопросы №№ 17-23	ПК-2
Освоение раздела № 5	Владеет компьютерными технологиями в анализе веществ и материалов	Правильные ответы на вопросы №№ 24-27	ПК-2

Успешность усвоения дисциплины характеризуется качественной оценкой на основании таблицы оценки сформированности компетенций, включающего совокупность критериев их освоения и выражается оценкой по пятибалльной шкале.

Качество освоения дисциплины	Уровень освоения дисциплины	Отметка в 5-балльной системе	Критерии
81-100 %	высокий	отлично	Теоретическое содержание дисциплины освоено полностью, без пробелов, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы, все предусмотренные рабочей программой дисциплины учебные задания выполнены.
66-80 %	средний	хорошо	Теоретическое содержание дисциплины освоено полностью, без пробелов, некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно, все предусмотренные рабочей программой дисциплины учебные задания выполнены, некоторые виды заданий выполнены с ошибками
51-65 %	средний	удовлетворительно	Теоретическое содержание дисциплины освоено частично, но пробелы не носят существенного характера, необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы, большинство предусмотренных рабочей программой дисциплины учебных заданий выполнено, некоторые из выполненных заданий, возможно, содержат ошибки.
0-50 %	ниже среднего	неудовлетворительно	Теоретическое содержание дисциплины освоено частично, необходимые практические навыки работы не сформированы, большинство предусмотренных рабочей программой дисциплины учебных заданий не выполнено, не может объяснить результаты лабораторных работ, при дополнительной самостоятельной работе над материалом курса возможно повышение качества выполнения учебных заданий

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.

а) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ОПК-3:

1. Специфика информационных технологий в области химии и материаловедения. Структурирование химической информации. Роль библиографических данных в химии.
2. Способы идентификации молекулярных и твердотельных химических объектов. Роль структурной информации в химии.
3. 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.

б) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-2:

4. Типы данных и форматы их представления в бинарной и текстовой форме. Разрядность численных данных. Особенности текстовых данных. Кодировки текста. Поддержка и версии форматов данных. Проблемы совместимости и переносимости данных.
5. Форматы текстовых данных. Кодовые таблицы. Разрядность кодировки. 8-битные кодовые таблицы. Стандарт UNICODE. Проблемы информационной избыточности и совместимости кодовых таблиц.

6. Форматы численных данных. Целые числа и числа с плавающей запятой. Бинарное и текстовое представление. Различия бинарных форматов для различных платформ.
7. Форматы структурно-химических данных. Проблемы совместимости и кросс-платформности. Молекулярные форматы (xyz, mol, pdb, Z-матрица). Принципы организации данных и информационная избыточность.
8. Средства трехмерной графики для визуализации химических данных. Операции проектирования. Аппаратная поддержка 3D-визуализации. Отображение графических примитивов: точки, линии, полигоны, трехмерные геометрические объекты и их поверхности. Эффекты освещения. Цветовая заливка и текстурирование.
9. Визуализация молекулярных объектов. Способы и стили 3D-представления атомов и химических связей. Мониторинг структурных параметров. Использование текста в 3D-графике: метки атомов, структурные характеристики. Программное обеспечение для 3D-визуализации (просмотра) молекулярных данных.
10. Проблемы редактирования и построения молекулярных структур в 3D-представлении. Неоднозначность операции обратного проектирования. Использование мониторов при 3D-редактировании. Оптимизация структуры молекул.
11. Визуализация молекулярных структурно-химических данных в виде двумерных структурных формул. Основные принципы. Стили отображения атомов и связей. Интерактивное конструирование и дизайн молекулярных химических структур. Шаблоны (темплеты) молекулярных фрагментов. Проверка (Check) и очистка (Clean Up) структуры. Химические 2D-редакторы.
13. Интеграция программного обеспечения в области визуализации и редактирования химических данных. Программные средства интеграции. Химический офис.
14. Формат описания твердых тел cif. Основные правила и ограничения текстовых записей. Синтаксис стандарта CIF. Основные теги CIF.
15. Особенности визуализации кристаллических структур. Отображение элементарной ячейки. Отображение периодических структур. Специальные стили 3D-визуализации кристаллов. Программы 3D-визуализации кристаллов.
16. Структурное моделирование и анализ кристаллических твердых тел. Модели поверхности кристалла и кристаллографических сечений объемной структуры.
17. Основные принципы практического построения квантово-химических моделей. Неэмпирические и полуэмпирические расчеты (уровень теории, атомный базис, электронная корреляция).
18. Квантово-химическое моделирование объема и поверхности твердых тел. Кластерный подход. Периодические граничные условия и модели кристаллических твердых тел.
19. Сравнительный анализ квантово-химического программного обеспечения для молекулярно-кластерных и периодических расчетов. Кросс-платформность и особенности интерфейса пользователя.
20. Задачи квантово-химического расчета и прогнозируемая информация.
21. Основные принципы построения заданий для квантово-химических расчетов и анализа их результатов.
22. Молекулярная динамика как средство моделирования термического поведения твердых тел. Фазовые переходы и полиморфные превращения. Сублимация и конденсация. Поверхностные явления.
23. Эмпирический характер молекулярно-динамических расчетов. Потенциалы межчастичного взаимодействия. Одно- и многоцентровые потенциалы. Проблемы динамического моделирования твердых фаз сложного состава. Квантово-молекулярная динамика.
24. Моделирование результатов дифракционных исследований как средство производства химической информации.
25. Сравнительный анализ программного обеспечения для молекулярно-динамических расчетов. Основные принципы построения заданий для расчетов и анализа их результатов.
26. 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.

27. Метод минимизации термодинамических потенциалов и метод констант равновесия. Модельные расчеты фазообразования в многокомпонентных системах. Прогноз термодинамического пути процесса и обход равновесия.

в) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-20:

28. Организация доступа к информации в локальных и глобальных компьютерных сетях. Физические средства компьютерных коммуникаций. Аппаратные средства компьютерных сетей, сетевые адаптеры, концентраторы и маршрутизаторы. Протоколы обмена данных низшего уровня. Структура IP-адреса и пространство IP-адресов. Ethernet.
29. Принципы построения и функционирования реляционных баз данных. Таблицы, поля и записи. Структурирование информации в базах данных и информационная избыточность. Ключевые поля. Поддержание целостности реляционных баз данных.
30. Доступ к глобальным базам данных (on-line и off-line). Администрирование доступа. Поиск и выборка информации. Основные принципы построения запроса к текстовым базам данных. Оптимизация запроса и логические операторы. Интеграция СУБД и интерактивных визуальных средств формирования запросов.
31. Поиск химической информации во всемирной сети. Основные типы источников информации и способы поиска. Поисковые машины и поисковые каталоги общего назначения. Критерии полноты и релевантности. Стратегия поиска.
32. Химические базы данных. Библиографические базы химических данных. Универсальные базы физико-химических и структурных данных. Специализированные базы данных по свойствам химических соединений. Особенности формирования запросов к химическим базам данных.
33. Библиографическая информация. Виды научных публикаций (книга, статья в периодическом издании, сборник научных трудов, материалы конференций, симпозиумов и семинаров, диссертации) и их библиографическое описание. Основные структурные элементы библиографической информации. Типовая структура библиографической базы данных.
34. Основные издательства и издания в области химии и материаловедения. Ограниченный библиографический и полнотекстовый доступ. Поиск химической информации на сайтах издательств.
35. Средства идентификации библиографической информации. Индексы DOI, ISBN, ISSN. Форматы библиографических данных RIS и BibTeX.
36. Задачи и возможности программных средств обработки библиографической информации. Локальные и Интернет-ориентированные программы. Менеджеры библиографических ссылок. Научные социальные сети.

К экзамену допускаются студенты, выполнившие все формы текущего и промежуточного контроля. При сдаче экзамена, студент получает два 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.