

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 17.11.2023 16:06:34  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Никольский В.М.

27 июня 2023 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Компьютерные технологии в науке и образовании

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль)

Аналитическая химия

Органическая химия

Физическая химия

Для студентов 1 курса

Очная форма

Составители: к.х.н., доцент, Межеумов И.Н.  
к.ф.-м.н., ст. преподаватель Малышев М.Д.

Тверь, 2023 г.

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины:**

Учебная дисциплина «Компьютерные технологии в науке и образовании» входит в обязательную часть цикла дисциплин подготовки магистрантов по всем трём специализациям химико-технологического факультета – аналитическая, органическая и физическая химия. Кроме этого, она отвечает потребностям подготовки дополнительной квалификации «Преподаватель».

**Уровень начальной подготовки.** По своему содержанию курс имеет целью покрыть дистанцию от курса “Информатика” (базовый курс) до современного уровня химика-исследователя и преподавателя химии. Он предполагает наличие у обучающегося начальных знаний химической информатики, а также практически закреплённых навыков работы на персональном компьютере и в сети интернет.

**Цель дисциплины** – задача упреждающей подготовки с тем, чтобы снабдить магистров навыками к самостоятельной работе в тех областях информационных технологий, которые в настоящее время только формируются, однако будут остро востребованы в течение 5-10 лет после завершения формального образования. В порядке практического приложения получаемых навыков магистранты в течение курса осваивают расчётные методы химических исследований, выполняют расширенный поиск литературы и интернет-ресурсов (литературный обзор) для одновременно подготавливаемых магистерских диссертаций.

### **Формирование и развитие у обучающихся следующих компетенций:**

- Ознакомление с многопроцессорными параллельными распределёнными (cloud) архитектурами и методами вычислений;
- Освоение мобильных платформ, методов коллективной работы над проектами и альтернативных (по отношению к Microsoft Office) офисных пакетов программ;
- Изучение и практическое освоение новых обучающих сред – подкастов, вебинаров, блогов, интернет-каналов в области химии;
- Практическое освоение методов простого и расширенного поиска в Интернете;
- Знакомство с электронными источниками химической информации: Химические журналы и специализированные сайты в Интернете. Каталоги и химические базы данных. Сетевые энциклопедии как источники для самообразования.

**В результате освоения дисциплины обучающийся должен** знать с перспективой на пять лет основные тенденции развития информационных технологий в химии и химическом образовании, практически применять их в своей исследовательской работе и подготовке магистерской диссертации.

*Формы контроля:* зачет, экзамен.

Целями освоения дисциплины являются:

- Освоение распределенных (cloud) методов вычислений
- Обучение коллективным методом работы над проектами на облаке
- Освоение мобильных платформ и методов коллективной работы над проектами
- Ознакомление с многопроцессорными параллельными методологиями вычислений
- \*Альтернативные (по отношению к Microsoft Office) офисные пакеты программ
- Изучение и практическое освоение новых обучающих сред – подкастов, вебинаров, блогов, интернет-каналов
- Практическое освоение методов простого и расширенного поиска в Интернете,
- Источники химической информации: Химические журналы и специализированные сайты в Интернете. Сетевые энциклопедии как источники для самообразования.
- Ознакомление с химическими каталогами и химическими базами данных.

## **2. Место дисциплины в структуре ООП:**

Дисциплина «Компьютерные технологии в науке и образовании» является заключительным курсом в цикле подготовке магистров в области информационных технологий («Информатика» - базовый курс). Ряд дисциплин циклов бакалавриата и магистратуры по задачам и методам связаны с данным курсом. Это курсы строения вещества, квантовой механики и квантовой химии, электрохимии, конформационного анализ, физико-химии полимеров, физических методов исследования вещества, а также ряд практикумов. Практически все химические и технологические курсы требуют развитых средств молекулярной графики (молекулярные редакторы), и средств контроля знаний – тестирования, доступа к химическим энциклопедиям и базам данных, что составляет основное содержание курса. При его прохождении закрепляются, систематизируются и обновляются знания, полученные при прохождении химических дисциплин. Два из основных курсов - квантовой механики и квантовой химии, и компьютерного моделирования особенно тесно интегрированы с нашим курсом, они пользуются общими программными средствами. Таким образом, интеграция курса компьютерных технологий с основными курсами профессионального образования химиков тесная и всесторонняя. Базовыми же предшествующими знаниями магистрантов снабжают курсы высшей математики, информатики, физики, общей и органической химии, а также, что немаловажно, курс английского языка.

### 3. Объем дисциплины:

4 зачетные единицы, 144 академических часов, в том числе

контактная аудиторная работа: лекции - 15 часов, практические занятия - 15 часов, в том числе практическая подготовка - 15 часов;

самостоятельная работа: 87 час, контроль - 27 часов.

### 4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы:

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.  ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.
ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.1. Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля;  ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.  ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

**5. Форма промежуточной аттестации:** 1 семестр – зачет; 2 семестр – экзамен.

**6. Язык преподавания:** русский.