

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова**

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А.Маракаев

« 24 » мая 2022 г.

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Компьютерные технологии»**

Направление подготовки  
04.04.01 Химия

Направленность (профиль)  
«Физико-органическая и фармацевтическая химия»

Форма обучения  
очная

Программа одобрена  
на заседании института  
от 14 апреля 2022 г., протокол № 8

Программа одобрена НМК  
факультета биологии и экологии  
протокол № 8 от 18 апреля 2022 г.

Ярославль

### 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является ознакомление магистрантов с направлениями применения компьютерных технологий в химических науках и химическом образовании.

### 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерные технологии» относится к обязательной части блока 1 дисциплин учебного плана (код в учебном плане Б1.О.03).

Дисциплина основывается на знаниях и навыках, полученных при изучении химических и информационных курсов соответствующего бакалавриата.

Полученные в курсе знания необходимы для выполнения магистерской диссертации, научно-исследовательской работы и практик, изучения дисциплин вариативной части.

### 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ООП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>		
<b>ОПК-1</b> 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.	<b>ОПК-1.2</b> Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	<b>Знать:</b> – направления применения компьютерных технологий в химии и химическом образовании. <b>Уметь:</b> – грамотно и эффективно использовать прикладные программные продукты при решении проблем области химии. <b>Владеть навыками:</b> – использования компьютерных технологий в научных исследованиях, образовании, производственных секторах реальной экономики химического профиля.
	<b>ОПК-1.3</b> Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач.	<b>Знать:</b> – современные расчетно-теоретические методы химии. <b>Уметь:</b> – грамотно и эффективно использовать расчетно-теоретические методы при решении проблем в области химии. <b>Владеть навыками:</b> – использования расчетно-теоретических методов.

<p><b>ОПК-3</b> Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.</p>	<p><b>ОПК-3.1</b> Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.</p>	<p><b>Уметь:</b> – грамотно и эффективно использовать современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля. <b>Владеть навыками:</b> – использования компьютерных технологий при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.</p>
	<p><b>ОПК-3.2</b> Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.</p>	<p><b>Знать:</b> – методики использования и адаптации программных продуктов при решении задач химического профиля. <b>Уметь:</b> – использовать и адаптировать прикладные программные продукты при решении проблем области химии. <b>Владеть навыками:</b> – использования стандартных и оригинальных программ в научных исследованиях, образовании, производственных секторах реальной экономики химического профиля.</p>
	<p><b>ОПК-3.3</b> Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p>	<p><b>Уметь:</b> – грамотно и эффективно использовать прикладные программные продукты для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ и процессов. <b>Владеть навыками:</b> – использования современных вычислительных методов для обработки данных.</p>

#### 4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 акад. часов.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)					Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам) Формы ЭО и ДОТ (при наличии)	
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания		самостоятельная работа
1	Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации. Работа с источниками информации. Использование баз научных и справочных данных по химии.	1	1		4			13	Задания для самостоятельной работы, контрольная работа
2	Основные принципы проверки достоверности научных гипотез и математических моделей. Компьютерная обработка экспериментальных данных и визуализация полученных результатов.	1	1		4	1		15	Задания для самостоятельной работы, контрольная работа
3	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений (строение, термодинамика и кинетика). Современные основные программные продукты.	1	1		4			16	Задания для самостоятельной работы, контрольная работа
4	Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований. Программные продукты Microsoft Excel, Microsoft PowerPoint, Grapher, Origin.	1	1		4	1		16	Задания для самостоятельной работы, контрольная работа
5	Образовательные ресурсы Интернет. Электронные образовательные комплексы, дистанционное обучение и автоматизированный контроль знаний.	1	1		4			16	Задания для самостоятельной работы, контрольная работа
							0,3	4,7	Зачет
	<b>ИТОГО</b>		<b>5</b>		<b>20</b>	<b>2</b>	<b>0,3</b>	<b>80,7</b>	

#### 4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

##### Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)					Место проведения занятий в форме практической подготовки	
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания		самостоятельная работа
1	Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации. Работа с источниками информации. Использование баз научных и справочных данных по химии.	1			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
2	Основные принципы проверки достоверности научных гипотез и математических моделей. Компьютерная обработка экспериментальных данных и визуализация полученных результатов.	1			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
3	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений (строение, термодинамика и кинетика). Современные основные программные продукты.	1			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
4	Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований. Программные продукты Microsoft Excel, Microsoft PowerPoint, Grapher, Origin.	1			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
5	Образовательные ресурсы Интернет. Электронные образовательные комплексы, дистанционное обучение и автоматизированный контроль знаний.	1			4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	<b>ИТОГО</b>				<b>20</b>				

## Содержание разделов дисциплины

1. Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации. Структура и поиск. Работа с источниками информации. Химические ресурсы. Использование баз научных и справочных данных по химии. Компьютеризация измерительной аппаратуры. Алгоритмы обработки и локальные базы аналитических сигналов. Работа со спектральными, хроматографическими и электрохимическим данными.

2. Основные принципы проверки достоверности научных гипотез и математических моделей. Компьютерная обработка экспериментальных данных и визуализация полученных результатов. Статистические методы.

3. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений (строение, термодинамика и кинетика). Современные основные программные продукты. Квантово-химическое моделирование. Неэмпирические и эмпирические методы. Применение результатов для интерпретации химического эксперимента.

4. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований. Программные продукты EXCEL, Grapher, Origin. MS PowerPoint. Оформление научных публикаций и докладов.

5. Образовательные ресурсы Интернет. Электронные библиотеки, информационные системы. Электронные образовательные комплексы, дистанционное обучение и автоматизированный контроль знаний. Структура, среды. Создание электронных УМК.

### **5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

**Вводная лекция** – дает первое целостное представление о дисциплине и знакомит магистрантов с системой изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с задачами и целями данного курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки в целом. На лекции рассматриваются методические и организационные особенности изучения данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

**Академическая лекция** – последовательное изложение учебного материала в виде монолога преподавателя с применением презентаций и таблиц по теме. Возможно также общение со студентами при рассмотрении примеров и фактов, знакомых из школьного материала или смежных учебных дисциплин. Требования к академической лекции: современный научный уровень, информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, современных фактов.

**Лабораторное занятие** предполагает рассмотрение неясных вопросов домашнего задания; ответы на контрольные вопросы по теме занятия. Выполнение лабораторной работы обеспечивает закрепление полученных теоретических знаний, обеспечивает освоение навыков самостоятельной лабораторной работы. Формулировка выводов по полученным результатам учит умению анализировать и обобщать полученные экспериментальные данные, развивает логическое мышление, помогает при выполнении выпускной работы бакалавра.

**Консультации** – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

**Электронный учебный курс «Компьютерные технологии» в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ**, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы обучающихся по темам дисциплины;
- представлены тексты лекций по отдельным темам дисциплины;
- представлен список учебной литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- посредством форума осуществляется синхронное и (или) асинхронное взаимодействие между обучающимися и преподавателем в рамках изучения дисциплины.

Дисциплина должна быть обеспечена как в локальном, так и в распределенном уровне следующими ресурсами:

- программа курса;
- раздел выбора раздела, темы и вопроса курса для изучения;
- перечень всех разделов и тем
- аннотация учебных вопросов каждой темы
- списки основной и дополнительной литературы
- средства навигации по материалам курса и вызова информационной поддержки;
- интерактивные учебные задания для самоконтроля, нацеленные на закрепление изучаемого материала и его лучшее понимание;
- тексты печатных учебных материалов, представленные в гипертекстовом виде;
- глоссарий имен и терминов.

#### **6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- операционные системы семейства Microsoft Windows;
- программы Microsoft Office;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome.

#### **7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)**

В процессе осуществления образовательного процесса по дисциплине используются:

- Автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT»  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)

#### **8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины**

##### **а) основная литература**

1. Орлов В.Ю., Русаков А.И., Тихонов С.В. Компьютерные технологии в образовательной и научной деятельности. – Ярославль, : ЯрГУ, 2005. – 124 с.  
<http://www.lib.uniyar.ac.ru/edocs/iuni/20050306.pdf>
2. Черткова, Е.А. Компьютерные технологии обучения : учебник для вузов / Е.А. Черткова. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Издательство Юрайт, 2018. – 297 с.  
<https://urait.ru/bcode/414747>
3. Марков, Ю.Г. Математические модели химических реакций : учебник / Ю.Г. Марков, И.В. Маркова. – Санкт-Петербург : Лань, 2013. – 192 с. – ISBN 978-5-8114-1483-3. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/30200>

#### **б) дополнительная литература**

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для вузов. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 495 с.  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=1274957&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1274957&cat_cd=YARSU)

#### **в) ресурсы сети «Интернет»**

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ  
([http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)).
2. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://www.edu.ru> (раздел Учебно-методическая библиотека) или по прямой ссылке <http://window.edu.ru/library>).
3. Научная библиотека ЯрГУ им. П.Г. Демидова (доступ к лицензионным современным библиографическим, реферативным и полнотекстовым профессиональным базам данных и информационным справочным системам: реферативные базы данных Web of Science, Scopus; научная электронная библиотека eLIBRARY.RU; электронно-библиотечные системы Юрайт, Проспект; базы данных Polpred.com, «Диссертации РГБ (авторефераты)», ProQuest Dissertations and Theses Global; электронные коллекции Springer; издательство Elsevier на платформе ScienceDirect; журналы Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS), Nature Publishing Group, Американского химического общества Core Package Web Edition (American Chemical Society – ACS) и др.)  
[http://www.lib.uniyar.ac.ru/content/resource/net\\_res.php](http://www.lib.uniyar.ac.ru/content/resource/net_res.php)

### **9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения лабораторных работ;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций,
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока, а в аудитории для лабораторных – списочному составу группы обучающихся.

Автор:

Профессор института  
фундаментальной и прикладной химии, д.х.н.

  
В.Ю. Орлов



**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины  
«Компьютерные технологии»**

**Фонд оценочных средств  
для проведения текущего контроля успеваемости  
и промежуточной аттестации студентов  
по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,  
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

**Задания для самостоятельной работы**

- Задание по теме 1.  
Системы поиска учебной и научной информации.
- Задание по теме 2.  
Алгоритмы обработки аналитических сигналов.
- Задание по теме 3.  
Статистические методы.
- Задание по теме 4.  
Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества.
- Задание по теме 5.  
Использование графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.
- Задание по теме 6.  
Компьютерные технологии в обмене учебной и научной информацией.
- Задание по теме 7.  
Образовательные ресурсы Интернет.
- Задание по теме 8.  
Дистанционное обучение.
- Задание по теме 9.  
Удаленный доступ к исследовательским ресурсам.
- 
- Контрольная работа № 1.  
Осуществить заданный поиск учебной и научной информации.
- Контрольная работа № 2.  
Провести обработку спектральных, хроматографических данных.
- Контрольная работа № 3.  
Провести визуализацию полученных результатов.
- Контрольная работа № 4.  
Провести квантово-химическое моделирование и интерпретацию результатов химического эксперимента.
- Контрольная работа № 5.  
Провести оформление научного доклада.
- Контрольная работа № 6.  
Разработать программу вебинара.
- Контрольная работа № 7.  
Создать каталог ресурсов по заданной тематике.
- Контрольная работа № 8.  
Предложить структуру электронного образовательного комплекса.
- Контрольная работа № 9.

Разработать структуру деятельности распределенной научной группы на основе технологий Интернет.

### **Правила выставления оценки за контрольную работу**

Каждая контрольная работа состоит из двух заданий по теме, выбранных преподавателем.

- «отлично» выставляется при правильном выполнении обоих заданий;
- «хорошо» выставляется при незначительной неточности выполнения одного из заданий;
- «удовлетворительно» выставляется при значительной неточности выполнения одного из заданий;
- «неудовлетворительно» выставляется при значительной неточности выполнения (или невыполнении) обоих заданий.

### **Правила выставления оценки самостоятельной работы:**

Письменная самостоятельная работа состоит из небольшого количества средних по трудности вопросов или заданий, требующих поиска обоснованного ответа. Письменная самостоятельная работа студента должна занимать не более 20-30 минут учебного занятия с разбором правильных решений на следующем занятии. В зависимости от уровня работы, студент получает за неё отметку «зачтено» или «не зачтено».

Критерии оценки письменной самостоятельной работы студента:

*Зачтено:* в письменной форме подготовлен развернутый ответ, содержащий основные знания по теме; логично представлен обобщающий материал по заданной проблеме.

*Не зачтено:* дано неправильное или же, в значительной степени, неполное раскрытие поставленной задачи с серьезными пробелами и сбоями в логике изложения материала; либо же Письменный ответ по заданию не получен вовсе.

### **Правила выставления оценки за отчет о лабораторной работе:**

- *Отлично* выставляется обучающемуся, если он полно и грамотно дает ответы на поставленные вопросы, аргументировано поясняет схемы, алгоритмы, умеет выделять главное, обобщать, делать выводы, устанавливать меж предметные связи; отсутствуют ошибки и недочеты при воспроизведении изученного материала.
- *Хорошо* выставляется обучающемуся, если он знает весь изученный программный материал, но в ответе на вопросы допускает недочеты, незначительные (негрубые) ошибки, применяет полученные знания на практике, испытывает затруднения при самостоятельном воспроизведении, требует незначительной помощи преподавателя.
- *Удовлетворительно* выставляется обучающемуся, если он при ответе допускает существенные недочеты (не менее 60% правильных ответов от общего числа), знает материал на уровне минимальных требований программы, затрудняется при ответах на видоизмененные вопросы.
- *Неудовлетворительно* выставляется обучающемуся, если он показывает знание и усвоение материала на уровне ниже минимальных требований программы, дает ответы с существенными недочетами (менее 60% правильных ответов от общего числа), отсутствует умение работать на уровне воспроизведения, допускает затруднения при ответах на стандартные вопросы

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций.

## 2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

### Список вопросов к зачету

1. Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации. Работа с источниками информации.
2. Базы WEB of SCI, SCOPUS. Возможности и работа с ними.
3. Использование баз научных и справочных данных по химии..
4. Компьютеризация измерительной аппаратуры. Алгоритмы обработки и локальные базы аналитических сигналов.
5. Обработка спектральных, хроматографических и электрохимических данных.
6. Основные принципы проверки достоверности научных гипотез и математических моделей.
7. Компьютерная обработка экспериментальных данных и визуализация полученных результатов.
8. Статистические методы в химии.
9. Основные информационные ресурсы по химии.
10. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений (строение, термодинамика и кинетика).
11. Современные основные программные продукты для компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений.
12. Квантово-химическое моделирование. Неэмпирические и эмпирические методы.
13. Применение результатов компьютерного моделирования для интерпретации химического эксперимента.
14. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.
15. Программные продукты EXCEL, Grapher, Origin. MS PowerPoint.
16. Оформление научных публикаций и докладов..
17. Компьютерные технологии в обмене учебной и научной информацией (электронная почта, электронные научные журналы, online-лекции и т.п.). Видеоконференции, вебинары.
18. Структура удаленных мероприятий, требования к оборудованию и программному обеспечению.
19. Компьютерные технологии в образовании. История и современное состояние.
20. Компьютерные тестовые системы.
21. Образовательные ресурсы Интернет.
22. Электронные библиотеки, информационные системы.
23. Электронные образовательные комплексы, дистанционное обучение и автоматизированный контроль знаний.
24. Электронные образовательные среды (WebTutor, Moodle).
25. Создание электронных УМК
26. Структура электронных образовательных курсов.
27. Требования к материалам для создания электронных образовательных курсов.
28. Современная организация научных исследований.
29. Удаленный доступ к исследовательским ресурсам.
30. Структура организации и работы в рамках удаленного доступа.
31. Создать каталог электронных образовательных ресурсов (10 наименований по тематике магистерской программы).
32. Создать каталог электронных научных ресурсов (10 наименований по тематике магистерской программы).

33. Оценить актуальность предполагаемой тематики магистерской диссертации по результатам работы с базами WEB of SCI, SCOPUS.

**Правила выставления оценки на зачете:**

Устный ответ студента на зачете оценивается по 2-х балльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- студент свободно владеет научной терминологией;
- ответ студента структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов;
- ответ студента логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ студента характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ студента иллюстрируется примерами, в том числе из собственной научно-исследовательской деятельности;
- студент демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию;
- студент демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

Отметка «незачтено» ставится, если:

- ответ студента обнаружил незнание или непонимание сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые студент не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета студент затрудняется дать ответ или не дает верных ответов;
- студент не демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

## **Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Компьютерные технологии»**

### **Методические указания для студентов по освоению дисциплины**

Изложение учебного материала по дисциплине «Компьютерные технологии» является комплексным: лекции, электронные учебные комплексы и материалы. В достаточно большом объеме используются подходы, связанные с анализом информационных ресурсов, программных продуктов, разработкой информационных систем, активным использованием компьютеров при обработке научных и образовательных данных.

Это связано с тем, что материалы лежащие в основе курса подготовлены из разрозненных источников (статьи, материалы конференций, монографии, аналитические обзоры, информационные ресурсы, программные продукты), они требуют адаптации и постоянной актуализации (связано с бурным развитием и расширением областей применения компьютерных технологий в науке и образовании).

По большинству тем предусмотрены лабораторные занятия, на которых происходит освоение применения компьютерных технологий в науке и образовании по направлению Химия.

Для успешного освоения дисциплины очень важно выполнение большого числа заданий, как в аудитории, так и самостоятельно. Примеры выполнения разбираются на лекциях, при необходимости по наиболее трудным темам проводятся дополнительные консультации.

Основная цель практических заданий – способностью эффективно использовать компьютерные технологии для обеспечения научной, образовательной, инновационной деятельности в области химии и химических технологий. Для решения всех задач необходимо знать и понимать лекционный материал. Поэтому в процессе изучения дисциплины рекомендуется регулярное повторение пройденного лекционного материала. Материал, представленный на лекциях, необходимо дома еще раз прорабатывать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, практических занятиях или из учебной литературы. Это также осуществляется в форме выполнения заданий для самостоятельной работы.

В качестве заданий для самостоятельной работы дома студентам предлагается решение проблем, аналогичных разобранным на лекциях и лабораторных занятиях или немного более сложные, которые являются результатом объединения нескольких базовых задач.

Для проверки и контроля усвоения теоретического материала, приобретенных практических навыков работы, проведения квантово-химических расчетов, в течение обучения проводятся мероприятия текущей аттестации в виде контрольных работ. Также проводятся консультации (при необходимости) по разбору заданий для самостоятельной работы, которые вызвали затруднения.

В конце курса изучения дисциплины магистранты сдают зачет. Зачет принимается по билетам, каждый из которых включает в себя два теоретических вопроса.

## **Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине**

В качестве учебно-методического обеспечения рекомендуется использовать литературу, указанную в разделе 8 данной рабочей программы.

Рекомендуемые интернет-ресурсы:

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ ([http://www.lib.uni Yar.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uni Yar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)).
2. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://www.edu.ru> (раздел Учебно-методическая библиотека) или по прямой ссылке <http://window.edu.ru/library>).
3. Системы Web of Science, Scopus.
4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.
5. Ресурс ChemNet Химическая наука и образование в России. <http://www.chem.msu.su/rus>
6. Сайт американского химического общества <http://pubs.acs.org>
7. Сайт королевского химического общества <http://www.rsc.org>
8. Электронные коллекции Springer <http://link.springer.com>