

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Федеральное государственное автономное образовательное**  
**учреждение высшего образования "Пермский**  
**государственный национальный исследовательский**  
**университет"**

Авторы-составители: **Медведева Наталья Александровна**

Рабочая программа дисциплины  
**ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**  
Код УМК 99338

Утверждено  
Протокол №7  
от «15» июня 2023 г.

Пермь, 2023

## **1. Наименование дисциплины**

Информационные технологии в материаловедении

## **2. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина входит в базовую часть Блока « М.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление подготовки: **04.04.01** Химия

направленность Химия, физика и механика материалов

### **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине**

В результате освоения дисциплины **Информационные технологии в материаловедении** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

**04.04.01** Химия (направленность : Химия, физика и механика материалов)

**ПК.3** Способен проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов

#### **Индикаторы**

**ПК.3.1** Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов

**ПК.3.2** Обрабатывает полученные данные с использованием современных методов анализа информации

#### 4. Объем и содержание дисциплины

<b>Направление подготовки</b>	04.04.01 Химия (направленность: Химия, физика и механика материалов)
<b>форма обучения</b>	очная
<b>№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины</b>	5
<b>Объем дисциплины (з.е.)</b>	3
<b>Объем дисциплины (ак.час.)</b>	108
<b>Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:</b>	36
<b>Проведение лекционных занятий</b>	12
<b>Проведение лабораторных работ, занятий по иностранному языку</b>	24
<b>Самостоятельная работа (ак.час.)</b>	72
<b>Формы текущего контроля</b>	Защищаемое контрольное мероприятие (1) Итоговое контрольное мероприятие (1) Письменное контрольное мероприятие (1)
<b>Формы промежуточной аттестации</b>	Экзамен (5 триместр)

## **5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины**

### **Информационные технологии в материаловедении**

Специфика информационных технологий в химии веществ и материалов. Форматы данных и представление химической информации. Поиск и обработка химической информации. Использование информационных технологий для прогнозирования свойств химических объектов. Компьютерные технологии в анализе веществ и материалов.

#### **1. Специфика информационных технологий в химии веществ и материалов**

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. Форматы данных и представление химической информации**

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).

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.

#### **3. Поиск и обработка химической информации**

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.)

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.

#### **4. Использование информационных технологий для прогнозирования свойств химических объектов**

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. Неэмпирические и полуэмпирические расчеты

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.

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.

### **5. Компьютерные технологии в анализе веществ и материалов**

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.

### **6. Итоговое контрольное мероприятие**

Итоговое мероприятие по рассмотренным темам в ходе изучения дисциплины (см. вопросы промежуточной аттестации).

## **6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины**

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

## **7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине**

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

## 8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

### Основная:

1. Материаловедение и технология материалов в 2 ч. Часть 2 : учебник для вузов / Г. П. Фетисов [и др.] ; ответственный редактор Г. П. Фетисов. — 8-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2021. — 410 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-15155-8. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. <https://www.ura.it.ru/bcode/487629>
2. Материаловедение и технология материалов в 2 ч. Часть 1 : учебник для вузов / Г. П. Фетисов [и др.] ; под редакцией Г. П. Фетисова. — 8-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2021. — 406 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-14075-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. <https://www.ura.it.ru/bcode/470775>
3. Компьютерные технологии в научных исследованиях : учебное пособие / Е. Н. Косова, К. А. Катков, О. В. Вельц [и др.]. — Ставрополь : Северо-Кавказский федеральный университет, 2015. — 241 с. — ISBN 2227-8397. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/63098.html>
4. Материаловедение и технологии обработки материалов : учебное пособие / О. А. Маркелова, В. А. Кошуро, В. М. Таран, А. А. Фомин. — Саратов : Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина, ЭБС АСВ, 2022. — 168 с. — ISBN 978-5-7433-3522-0. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. <https://www.iprbookshop.ru/128032>
5. Моделирование систем и процессов. Практикум : учебное пособие для академического бакалавриата / В. Н. Волкова [и др.] ; под редакцией В. Н. Волковой. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 295 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-534-01442-6. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.ura.it.ru/bcode/436475>
6. Программное обеспечение мехатронных и робототехнических систем : учебное пособие / А. И. Изюмов, Е. Б. Лаврентьев, С. И. Попов, Э. В. Марченко. — Ростов-на-Дону : Донской государственный технический университет, 2023. — 64 с. — ISBN 978-5-7890-2098-2. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. <https://www.iprbookshop.ru/130456>
7. Моделирование систем и процессов : учебник для академического бакалавриата / В. Н. Волкова [и др.] ; под редакцией В. Н. Волковой, В. Н. Козлова. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 450 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-9916-7322-8. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.ura.it.ru/bcode/436458>

### Дополнительная:

1. Компьютерные технологии : учебно-методический комплекс / составители С. А. Омарова, Б. К. Тульбасова, О. С. Ахметова. — Алматы : Нур-Принт, 2012. — 146 с. — ISBN 2227-8397. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/67068.html>
2. Компьютерные технологии при проектировании и эксплуатации технологического оборудования : учебное пособие / Г. В. Алексеев, И. И. Бриденко, В. А. Головацкий, Е. И. Верболоз. — Саратов : Вузовское образование, 2017. — 171 с. — ISBN 978-5-4487-0004-0. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/65620.html>



3. Информационные технологии в образовании: лабораторный практикум : учебное пособие / И. Н. Власова, М. Л. Лурье, И. В. Мусихина, А. Н. Худякова. — Пермь : Пермский государственный гуманитарно-педагогический университет, 2015. — 100 с. — ISBN 2227-8397. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/70624.html>

4. Компьютерные технологии : лабораторный практикум / составители С. А. Сазонова, С. А. Колодяжный, Е. А. Сушко. — Воронеж : Воронежский государственный архитектурно-строительный университет, ЭБС АСВ, 2015. — 147 с. — ISBN 978-5-89040-548-7. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/55002.html>

## 9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

<https://rucont.ru/collections/4523?ysclid=ll0ofet3d7599718955> Национальный цифровой ресурс Руконт

<https://fea.ru/article/cae-centre-spbpu> Цифровая платформа по разработке и применению цифровых двойников

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

Образовательный процесс по дисциплине **Информационные технологии в материаловедении** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);

доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС);

доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

При освоении материала и выполнении заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ ([student.psu.ru](http://student.psu.ru)).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

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

1. Лекционные занятия – лекционный зал, ауд. 506 Университетского образовательного центра ПНППК, оснащенный презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, маркерной доской.

2. Лабораторные занятия – Компьютерный класс, ауд. 503/509 Университетского образовательного центра ПНППК, "Лаборатория искусственного интеллекта ПНППК, оснащенные специализированным оборудованием. Состав оборудования определен в Паспорте лабораторий.

3. Для групповых (индивидуальных) консультаций – аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

4. Для проведения текущего контроля – аудитория, оснащенная меловой (и) или маркерной доской.

5. Самостоятельная работа – Компьютерный класс, ауд. 503/509 Университетского образовательного центра ПНППК, "Лаборатория искусственного интеллекта ПНППК, оснащенные специализированным оборудованием. Состав оборудования определен в Паспорте лабораторий, оснащенные специализированным оборудованием. Состав оборудования определен в Паспорте лабораторий. Аудитория для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета. Помещения Научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными

компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине  
Информационные технологии в материаловедении**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.  
Индикаторы и критерии их оценивания**

**ПК.3**

**Способен проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов**

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p><b>ПК.3.2</b> Обрабатывает полученные данные с использованием современных методов анализа информации</p>	<p>Знать способы организации доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях. Уметь формировать информационные запросы к химическим базам данных и осуществлять поиск химической информации в сети Интернет. Владеть приемами компьютерного дизайна молекулярных и кристаллических материалов.</p>	<p align="center"><b>Неудовлетворител</b></p> <p>Не знает способы организации доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях. Демонстрирует отсутствие умений формировать информационные запросы к химическим базам данных и осуществлять поиск химической информации в сети Интернет. Не владеет приемами компьютерного дизайна молекулярных и кристаллических материалов.</p> <p align="center"><b>Удовлетворительн</b></p> <p>Общие, но не структурированные знания способов организации доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях. Демонстрирует частично сформированное умение формировать информационные запросы к химическим базам данных и осуществлять поиск химической информации в сети Интернет. Демонстрирует фрагментарное применение навыков компьютерного дизайна молекулярных и кристаллических материалов.</p> <p align="center"><b>Хорошо</b></p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания способов организации доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях. Демонстрирует умение формировать информационные запросы к химическим базам данных и осуществлять поиск химической информации в сети Интернет. В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы в навыке компьютерного дизайна молекулярных и</p>

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p><b>Хорошо</b> кристаллических материалов.</p> <p><b>Отлично</b> Сформированы знания способов организации доступа и поиска химической информации в компьютерных сетях. Демонстрирует умения формировать информационные запросы к химическим базам данных и осуществлять поиск химической информации в сети Интернет. Сформирован навык владения компьютерного дизайна молекулярных и кристаллических материалов.</p>
<p><b>ПК.3.1</b> Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов</p>	<p>Знать основные принципы формализации химической информации и основные принципы моделирования химических объектов и прогнозирования их свойств. Знать основные принципы повышения информативности физико-химических методов анализа материалов. Уметь визуализировать химическую информацию, осуществлять построение и анализ компьютерных моделей. Владеть программными средствами визуализации и анализа химических объектов и приемами практического моделирования молекулярных и конденсированных сред.</p>	<p><b>Неудовлетворител</b> Не знает основные принципы формализации химической информации и основные принципы моделирования химических объектов и прогнозирования их свойств. Не знает основные принципы повышения информативности физико-химических методов анализа материалов. Демонстрирует отсутствие умение визуализировать химическую информацию, осуществлять построение и анализ компьютерных моделей. Не владеет программными средствами визуализации и анализа химических объектов и приемами практического моделирования молекулярных и конденсированных сред.</p> <p><b>Удовлетворительн</b> Общие, но не структурированные знания основных принципов формализации химической информации и основные принципы моделирования химических объектов и прогнозирования их свойств. Частично сформированные знания основных принципы повышения информативности физико-химических методов анализа материалов. Демонстрирует частично сформированное умение визуализировать химическую информацию, осуществлять построение и анализ компьютерных моделей. Демонстрирует фрагментарное применение навыков программными средствами визуализации и анализа</p>

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;"><b>Удовлетворительн</b></p> <p>химических объектов и приемами практического моделирования молекулярных и конденсированных сред.</p> <p style="text-align: center;"><b>Хорошо</b></p> <p>Сформированные, но содержащие отдельные пробелы в знании основных принципов формализации химической информации и основные принципы моделирования химических объектов и прогнозирования их свойств. Частично сформированные знания основных принципы повышения информативности физико-химических методов анализа материалов. В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы в умении визуализировать химическую информацию, осуществлять построение и анализ компьютерных моделей. Демонстрирует применение навыков программными средствами визуализации и анализа химических объектов и приемами практического моделирования молекулярных и конденсированных сред.</p> <p style="text-align: center;"><b>Отлично</b></p> <p>Сформированы знания основных принципов формализации химической информации и основные принципы моделирования химических объектов и прогнозирования их свойств. Знает основные принципы повышения информативности физико-химических методов анализа материалов. Умеет визуализировать химическую информацию, осуществлять построение и анализ компьютерных моделей. Демонстрирует применение навыков программными средствами визуализации и анализа химических объектов и приемами практического моделирования молекулярных и конденсированных сред.</p>

## Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

**Вид мероприятия промежуточной аттестации :** Экзамен

**Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации :** Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

**Максимальное количество баллов :** 100

### Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 43 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 43 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
<b>ПК.3.2</b> Обрабатывает полученные данные с использованием современных методов анализа информации <b>ПК.3.1</b> Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов	3. Поиск и обработка химической информации <b>Письменное контрольное мероприятие</b>	Знает классификацию программного обеспечения в области химических информационных технологий, специфику химической информации. Умеет применять информационные ресурсы и программное обеспечение в области химических информационных технологий (базы данных, средства моделирования и визуализации, идентификация химических объектов). Осуществляет визуализацию структурно-химических данных.
<b>ПК.3.2</b> Обрабатывает полученные данные с использованием современных методов анализа информации <b>ПК.3.1</b> Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов	5. Компьютерные технологии в анализе веществ и материалов <b>Защищаемое контрольное мероприятие</b>	Знает общие принципы моделирования молекул и твердых тел, основные принципы практического построения квантово-химических моделей. Умеет решать задачи квантово-химического расчета и получать информацию о состоянии материала и его свойствах. Владеет навыком применения информационных технологий в кристаллографии, дифракционных и спектральных методах анализа.

<b>Компетенция (индикатор)</b>	<b>Мероприятие текущего контроля</b>	<b>Контролируемые элементы результатов обучения</b>
<p><b>ПК.3.2</b> Обрабатывает полученные данные с использованием современных методов анализа информации</p> <p><b>ПК.3.1</b> Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов</p>	<p>6. Итоговое контрольное мероприятие</p> <p><b>Итоговое контрольное мероприятие</b></p>	<p>Знает специфику информационных технологий в химии веществ и материалов. Знает форматы данных и представление химической информации. Владеет поиском и обработкой информации в области химического материаловедения. Умеет использовать информационные технологии для прогнозирования свойств химических объектов. Владеет компьютерными технологиями в анализе веществ и материалов.</p>

### **Спецификация мероприятий текущего контроля**

#### **3. Поиск и обработка химической информации**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
Информационное представление и визуализация кристаллов. Три кристалла с различной кристаллографической структурой. Каждый кристалл - 4 балла. Всего 12 баллов	12
Поиск химических данных во всемирной компьютерной сети по заданным параметрам.	9
Компьютерный дизайн молекулярных соединений. Три соединения различной геометрией (структурой). Каждое соединение 3 балла. Всего 9 баллов.	9

#### **5. Компьютерные технологии в анализе веществ и материалов**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **13**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
Компьютерная обработка рентгенографических данных. Симуляция и восстановление (визуализация) структуры объекта, для которого осуществляется обработка рентгенограммы.	10
Компьютерная обработка рентгенографических данных. Идентификация структуры с использованием кристаллографических баз данных.	8



Квантово-химическое моделирование электронной структуры кристаллов.	7
Компьютерная обработка спектральных данных.	5

### **6. Итоговое контрольное мероприятие**

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**

Проходной балл: **17**

<b>Показатели оценивания</b>	<b>Баллы</b>
Выполнение заданий с помощью специальных (инструментальных средств). Всего 5 заданий. Каждое задание - 5 баллов. Итого 25 баллов.	25
Выполнение тестовых заданий. Всего 10 заданий. Каждое задание - 1,5 балла. Итого 15 баллов.	15