


МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»  
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

СОГЛАСОВАНО  
Руководитель ОПОП

  
\_\_\_\_\_ А.Г. Тырков  
«\_24\_» \_\_ января\_\_ 2025\_ г.

СОГЛАСОВАНО  
Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_ Л.А. Джигола  
«\_24\_» \_\_ января\_\_ 2025\_ г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**«КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ»**

Составитель	<b>Золотарева Н.В., к.т.н., доцент, доцент кафедры ХМ</b>
Направление подготовки / специальность	<b>04.03.01 ХИМИЯ</b>
Направленность (профиль) ОПОП	<b>ХИМИЯ</b>
Квалификация (степень)	<b>Бакалавр</b>
Форма обучения	<b>Очная</b>
Год приема	<b>2023</b>
Курс	<b>4</b>
Семестр	<b>8</b>

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**1.1. Целью освоения дисциплины «Компьютерная химия»** является знакомство студентов с теоретическими основами компьютерной химии и ее возможностями.

**1.2. Задачи освоения дисциплины «Компьютерная химия»** научить студентов применению методов математического моделирования для решения химических задач.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

**2.1. Учебная дисциплина «Компьютерная химия»** относится к части, формируемой участниками образовательных отношений и осваивается дисциплина в 8 семестре. Дисциплина встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

**2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами:**

- «Математика»

Знания: представления о функциях одной и нескольких переменных; статистическая обработка данных;

Умения: решение систем линейных и нелинейных уравнений; построение корреляционных зависимостей;

Навыки: осуществлять интегрирование и дифференцирование функций; решения дифференциальных уравнений; обработка экспериментальных данных.

- «Информатика»

Знания: представлениями об устройстве компьютера, функционировании системного и прикладного программного обеспечения;

Умения: работать в программных комплексах по направлению подготовки;

Навыки: использования электронных баз данных, программных пакетов для обработки и построения корреляционных зависимостей.

- «Квантовая механика и квантовая химия»

Знания: представления о математических операторах и постулатах, о моделях описания водородоподобных атомов и многоэлектронных систем;

Умения: решать типовые модельные квантово-механические задачи, в частности, вычислять энергию системы приближенными методами;

Навыки: использования вычислительных схем прогноза реакционной способности молекул и оценки термодинамики и кинетики химических процессов.

- «Химическая технология»

Знания: основные фундаментальные понятия химической технологии;

Умения: использовать основные закономерности и фундаментальные понятия химической технологии для решения практических и производственных задач;

Навыки: владеть навыками расчета основных технических показателей технологического процесса, алгоритмами вычислений.

- «Физическая химия»

Знания: представления об основных химических законах, описывающих химическое равновесие;

Умения: решать задачи по теме ступенчатой диссоциации в растворах;

Навыки: решения задач по термодинамике, кинетике химических реакций и каталитических процессов; обработка экспериментальных данных.

**2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:**

- Преддипломная практика.

В первую очередь, это дисциплины модуля профессиональной направленности, для изучения которых необходимо использование технологий обработки информации, представленной в цифровом виде, для безопасной работы с Интернет-ресурсами, а также, при прохождении всех видов практики (учебная, производственная) и подготовки выпускной квалификационной работы. Освоение дисциплины возможно с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий.

### 3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

б) профессиональных (ПК):

*ПК-1 – Способен проводить сбор, анализ и обработку информации, необходимой для решения задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.*

*ПК-2. Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности*

**Таблица 1 - Декомпозиция результатов обучения**

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты освоения дисциплины		
	Знать (1)	Уметь (1)	Владеть (1)
<i>ПК-1</i>	ИПК-1.1.1 Систематизирует отдельные стадии исследования, подготавливает результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений ИПК-1.1.2 ключевые программные пакеты, онлайн ресурсы для составления многопоточных задач, этапы выполнения НИР.	ИПК-1.2.1 анализирует результаты экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов ИПК-1.2.2 использовать математический аппарат и алгоритмы численного представления и систематизации полученных результатов	ИПК-1.3.1 выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач ИПК-1.3.2 приемами, техникой сбора, систематизации и обработки данных, а также их графической визуализации и интерпретации
<i>ПК-2</i>	ИПК-2.1.1 классификацию химических процессов и алгоритмы их описания ИПК-2.1.2. Основные математические методы обработки экспериментальных данных	ИПК-2.2.1 Составлять таблицы данных, связывать ключевые позиции, выстраивать закономерности процессов ИПК-2.2.2 использовать математические методы и модели для решения прикладных задач	ИПК-2.3.1 навыками составления СУБД по направлению исследования ИПК-2.3.2 методами количественного анализа процессов обработки, поиска и передачи информации

### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет **2 зачетные единицы**, в том числе 45 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них 15 часов – лекции, 30 часов – лабораторные работы), и 27 часов – на самостоятельную работу обучающихся.

**Таблица 2 - Структура и содержание дисциплины**

№ п/п	Наименование радела (темы)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самостоятельная работа (в часах)		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
<b>Раздел I. Введение в дисциплину: электронные базы данных, информационно-справочные и поисковые системы</b>								
1	<i>Тема 1.1</i> Компьютерная химия – важный жизненный навык. Элементы цифровой грамотности и базовые компетенции личности.	8	2		6		2	Отчет по лабораторной работе №1 за ПК
2	<i>Тема 1.2</i> Цифровые инструменты для организации командного взаимодействия и совместной деятельности. Сервисы, платформы для организации и проведения веб-конференций и вебинаров.	8	2		6		2	Отчет по лабораторной работе №2 за ПК
<b>Раздел II. Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных</b>								
3	<i>Тема 2.1</i> Практические методы поиска и анализа информации в Интернете. Интернет-технологии поиска информации.	8	2		6		2	Отчет по лабораторной работе №3 за ПК
4	<i>Тема 2.2</i> Научные поисковые системы и платформы.	8	4		6		11	Отчет по лабораторной работе №4 за ПК
<b>Раздел III. Цифровые компетенции: информационная грамотность</b>								
5	<i>Тема 3.1</i> Цифровые	8	2		4		6	Отчет по лабораторной работе №5 за ПК

	компетенции (для любой сферы). Социальные сети. Цифровой след. Работа с информацией в сети.							
6	<i>Тема 3.2</i> Компьютерная грамотность: просмотр, поиск и фильтрация данных, информации и цифрового контента. Оценка, анализ данных, информации и цифрового контента.	8	3		2		4	Отчет по лабораторной работе №6 за ПК
<b>ИТОГО</b>			<b>15</b>		<b>30</b>		<b>27</b>	<b>ЗАЧЕТ</b>

*Примечание:* Л – лекция; ПЗ – практическое занятие, семинар; ЛР – лабораторная работа; КР – курсовая работа; СР – самостоятельная работа.

**Таблица 3- Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины (модуля) и формируемых в них компетенций**

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	Компетенции		Общее количество компетенций
		<i>ПК-1</i>	<i>ПК-2</i>	
<b><i>Раздел I. Введение в дисциплину: электронные базы данных, информационно-справочные и поисковые системы</i></b>				
<i>Тема 1.1</i> Компьютерная химия – важный жизненный навык. Элементы цифровой грамотности и базовые компетенции личности.	10	+	+	2
<i>Тема 1.2</i> Цифровые инструменты для организации командного взаимодействия и совместной деятельности. Сервисы, платформы для организации и проведения веб-конференций и вебинаров.	10	+	+	2
<b><i>Раздел II. Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных</i></b>				
<i>Тема 2.1</i> Практические методы поиска и анализа информации в Интернете. Интернет-технологии поиска информации.	10	+	+	2
<i>Тема 2.2</i> Научные поисковые системы и платформы.	21	+	+	2
<b><i>Раздел III. Цифровые компетенции: информационная грамотность</i></b>				

<i>Тема 3.1</i> Цифровые компетенции (для любой сферы). Социальные сети. Цифровой след. Работа с информацией в сети.	12	+	+	2
<i>Тема 3.2</i> Компьютерная грамотность: просмотр, поиск и фильтрация данных, информации и цифрового контента. Оценка, анализ данных, информации и цифрового контента.	9	+	+	2
<b>Итого</b>	<b>72</b>			

## КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ

### Раздел 1. Введение в дисциплину: электронные базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Компьютерная химия – важный жизненный навык. Элементы цифровой грамотности и базовые компетенции личности. Стратегические подходы к цифровой грамотности в образовании. Свободное и открытое программное обеспечение. Облачные сервисы. Интернет-сервисы для организации совместной работы. Теория информации и типичные информационные технологии. Компьютер, элементы программирования. Программное обеспечение. Особенности химических вычислений на ЭВМ. Базы данных и компьютерные сети. Электронная почта. Планировщики, органайзеры. Файлообменники. Системы управления проектами и индивидуальными задачами в режиме онлайн. *Лабораторная работа 1.* Цифровые инструменты для организации командного взаимодействия и совместной деятельности. Составление ментальных (ассоциативных) карт в процессе обучения. Использование виртуальных досок. Сервисы, платформы для организации и проведения веб-конференций и вебинаров. *Лабораторная работа 2.* Основные направления использования цифровых технологий. Цифровые и онлайн-ресурсы. Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации. Принципы организации баз научных и справочных данных. Теория информации и типичные информационные технологии. Понятие модели. Классификация. Компьютер, элементы программирования. Базы данных и компьютерные сети. Специализированные электронные базы данных (химического, биологического, химико-технологического и фармакологического направлений). Ознакомление с банком термодинамических данных NIST, рекомендациями ИЮПАК по значениям констант скорости простых реакций, информационными возможностями Chemweb. Компьютеризация измерительной аппаратуры. Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура. Компьютерный химический практикум. Работа с поисковыми базами данных. Online-поисковые системы: [ChemSpider](http://www.chemspider.com/) (<http://www.chemspider.com/>); [PubChem](http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/) (<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>); [ChemSynthesis](http://www.chemsynthesis.com/) (<http://www.chemsynthesis.com/>); [RCSB Protein Data Bank](http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do) (<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>); [KEGG LIGAND Database](http://www.genome.jp/kegg/ligand.html) (<http://www.genome.jp/kegg/ligand.html>); [Chemical Abstracts Service](http://www.cas.org/) (<http://www.cas.org/>); [EMSL Basis Set Exchange](https://bse.pnl.gov/bse/portal) (<https://bse.pnl.gov/bse/portal>); [Crystallography Open Database](http://www.crystallography.net/cod/) (<http://www.crystallography.net/cod/>); [ChemSub Online](http://chemsub.online.fr/) (<http://chemsub.online.fr/>) и др.

### Раздел 2. Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных

Практические методы поиска и анализа информации в Интернете. Интернет-технологии поиска информации. Запросы в поисковых системах. Источники информации. Использование информации. Образовательные возможности сети Интернет. Современные виды цифровых образовательных ресурсов. *Лабораторная работа 3.* Электронная информационно-образовательная среда АГУ. Цифровая экономика. Цифровые технологии и цифровые услуги. Потребление цифровых услуг. Мобильное обучение: возможности и перспективы. Облачные технологии в образовании. Социальные медиа. Учебные платформы и их использование в

образовании. Администрирование образовательной организации с помощью цифровых технологий. Цифровая аналитика в образовании. Научные поисковые системы и платформы. *Лабораторная работа 4.* Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных.

### **Раздел 3. Компьютерная грамотность: возможности текстового редактора для подготовки и оформления документации реализация цифрового контента**

Навыки XXI века: Компьютерная грамотность: просмотр, поиск и фильтрация данных, информации и цифрового контента. Оценка, анализ данных, информации и цифрового контента. Управление данными, информацией и цифровым контентом. Возможности текстового редактора для подготовки и оформления документации. Связь и сотрудничество: виды взаимодействия с использованием цифровых технологий, обмен цифровыми технологиями. Участие в общественной жизни и сотрудничество с использованием цифровых технологий. Соблюдение сетевого этикета. Управление цифровыми идентификаторами. Интеграция и изменение цифрового образовательного контента. Авторские права и лицензия. Работа с электронными таблицами для визуализации результатов исследований. *Лабораторная работа 5* Поиск и фильтрация информации. Создание цифрового дашборда. Элементы программирования при разработке банка данных. Составление банка данных по направлению исследований. Создание таблиц в приложении Microsoft Office Access. Создание таблиц и связей между таблицами. Запросы. Формы. Создание и использование форм в базе данных. Создание отчетов. *Лабораторная работа 6.* Страницы доступа к данным. Создание макросов и кнопочной панели. Компьютерный химический практикум. Правила составления заявки на официальную регистрацию базы данных.

## **5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **5.1. Указания для преподавателей по организации и проведению учебных занятий по дисциплине**

Преподаватель должен активно непосредственно участвовать в учебном процессе и проводить подготовку к нему. Необходимость постоянной подготовки к лекциям, семинарским и практическим занятиям обусловлена потребностью отражать современные подходы, взгляды, данные по темам и разделам. Проводя подготовку к учебному процессу необходимо изучать современные методические рекомендации, результаты научных исследований, новые технологии и т.д. При реализации различных видов учебной работы преподаватель должен использовать образовательные технологии: создание интерактивных презентаций, обучающие компьютерные программы, технологии развития мышления (эффективная лекция, таблицы, работа в группах и т.д.)

В ходе подготовки лекции преподаватель должен разрабатывать план лекции, в котором должен определить те основные материалы, которые слушатели должны понять и записать. Содержание лекции должно быть организованным и четким, что делает усвоение материала доступным. Содержание лекции должно отвечать следующим требованиям: изложение материала от простого к сложному; от известного к неизвестному; логичность, четкость и ясность в изложении материала; возможность проблемного изложения; дискуссии и диалога в конце лекции с целью активизации деятельности слушателей; опора смысловой части лекции на подлинные факты, события, явления, статистические данные; тесная связь теоретических положений и выводов с практикой и профессиональной деятельностью. В ходе лекционного занятия преподаватель должен четко озвучить тему, представить план, кратко изложить цель, учебные вопросы. Раскрывая содержание учебных вопросов, акцентировать внимание на основных категориях, явлениях и процессах, особенностях их протекания. Следует также раскрывать сущность и содержание различных точек зрения и научных подходов к объяснению тех или иных явлений и процессов. При изложении лекционного материала следует аргументировано обосновать собственную позицию по спорным теоретическим вопросам, приводя примеры,

раскрывать положительный отечественный и зарубежный опыт. По ходу изложения, возможно, задавать риторические вопросы и самому давать на них ответ. Преподаватель в целом не должен отвлекаться от излагаемого материала лекции. Преподаватель должен руководить работой слушателей по конспектированию лекционного материала, подчеркивать необходимость отражения в конспектах основных положений изучаемой темы. Используемый во время лекции наглядный материал – слайды, таблицы, схемы, иллюстрации помогает вести конспекты и улучшает темп предложения материала лекций. В заключительной части лекции необходимо сформулировать общие выводы по теме, раскрывающие содержание всех вопросов, поставленных в лекции. Для закрепления материала, подготовки к семинарским и практическим занятиям и выполнения самостоятельной работы необходимо рекомендовать литературу, основную и дополнительную, в том числе учебно-методические материалы, а также электронные источники (Интернет-ресурсы). Лекционный материал выстроен следующим образом: изложение материала ведется от простого к сложному, от известного к неизвестному с включением интерактивных методов; выстраивается логичность, четкость и ясность изложения материала с примерами выполнения заданий; с целью активизации деятельности студентов часть лекционного материала включает проблемные актуальные темы с дискуссией (диалогом).

При подготовке к лабораторным (лабораторно-вычислительным) занятиям студентам отводится время на самостоятельную работу, которая включает изучение материалов лекционного курса, ознакомление с материалами, изложенными в учебниках и иных источниках информации, включая поисковую работу в интернете, выполнение заданий для самоконтроля и подготовку отчетов, презентаций, выполнений лабораторных заданий на ПК.

Предусмотрено самостоятельное выполнение заданий по отдельным темам дисциплины. Пакет заданий выдается в начале изучения соответствующих тем. Задания выполняются с использованием программных приложений, предусмотренных данной рабочей программой. Комплект заданий компьютерного практикума (лабораторные работы) выдается в начале изучения соответствующих тем. Задания выполняются за персональным компьютером. В тетради должен быть составлен аннотированный список. Оформленная тетрадка сдается преподавателю на проверку перед текущей лабораторной работой.

## **5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины**

При подготовке к лабораторно-вычислительным работам студентам отводится время на самостоятельную работу, которая включает изучение материалов лекционного курса, ознакомление с материалами, изложенными в учебниках и иных источниках информации, включая поисковую работу в интернете, выполнение домашних (задач для самоконтроля) и тестовых заданий. Полезно использовать образовательный портал электронного образования Астраханского государственного университета им. В.Н. Татищева (<http://moodle.asu-edu.ru/>) на котором постоянно обновляется информация о текущих заданиях и присутствует необходимый материал по курсу учебной дисциплины.

Подготовка презентаций осуществляется по ключевым направлениям математического моделирования химических и химико-технологических процессов подготовки нефти и газа. Полный перечень тем размещен в разделе «Темы для подготовки презентаций» к выполнению лабораторно-вычислительной работы. Подготовка презентаций позволяет не только развивать навыки публичных выступлений, студенты учатся уверенно доносить идеи, информацию перед аудиторией, что полезно как в учебе, так и в будущей профессиональной деятельности.

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

1. Бутырская, Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е. В. Бутырская. - Москва: СОЛОН-ПРЕСС, 2020. - 224 с. (Серия "Библиотека студентов") - ISBN 978-5-91359-095-4. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785913590954.html>

2. Омельченко В.П., Информационные технологии в профессиональной деятельности / Омельченко В.П., Демидова А.А. - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2019. - 432 с. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970450352.html> (ЭБС «Консультант студента»)
3. Боброва И.И., Информационные технологии в образовании / Боброва И.И. - М.: ФЛИНТА, 2019. - 195 с. URL : <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785976520851.html> (ЭБС «Консультант студента»)
3. Золотарева Н.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 86 с.
4. Золотарева Н.В. Численные методы анализа в химии: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 78 с.
5. Математические методы решения химических задач: доп. УМО по клас. унив. образованию в качестве учеб. пособия для студентов вузов...по направ. подготовки "Химия" / А.И. Козко и др. - М.: Академия, 2013. - 368 с.
6. Гаврилова З.П. Информационные технологии: учебное пособие / Гаврилова З.П. - Ростов н/Д: Изд-во ЮФУ, 2011. - 90 с. Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785927508938.html>
7. Норенков И.П., Информационные технологии в образовании / Норенков И.П., Зимин А.М. - М.: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2004. - 352 с. (Информатика в техническом университете) - ISBN 5-7038-2434-6 - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5703824346.html>
8. Фармацевтическая химия: учебник / Под ред. Г. В. Раменской. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 640 с. Систем. требования: Adobe Reader XI; экран 10". - ISBN 978-5-00101-824-7. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001018247.html>

**Таблица 4- Содержание самостоятельной работы обучающихся**

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Форма работы
<b>Раздел I. Введение в дисциплину: электронные базы данных, информационно-справочные и поисковые системы</b>		
<b>Тема 1.1 Компьютерная химия – важный жизненный навык. Элементы цифровой грамотности и базовые компетенции личности.</b> Программное обеспечение. Особенности химических вычислений на ЭВМ. Базы данных и компьютерные сети. Электронная почта. Планировщики, органайзеры. Файлообменники. Системы управления проектами и индивидуальными задачами в режиме онлайн.	2	Оформление отчета по лабораторной работе №1 за ПК
<b>Тема 1.2 Цифровые инструменты для организации командного взаимодействия и совместной деятельности. Сервисы, платформы для организации и проведения веб-конференций и вебинаров.</b> Составление ментальных (ассоциативных) карт в процессе обучения. Использование виртуальных досок. Сервисы, платформы для организации и проведения веб-конференций и вебинаров.	2	Оформление отчета по лабораторной работе №2 за ПК
<b>Тема 2. Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных</b>		
<b>Тема 2.1 Практические методы поиска и анализа информации в Интернете. Интернет-технологии поиска информации.</b> Современные виды цифровых образовательных ресурсов. Электронная информационно-образовательная среда АГУ.	2	Оформление отчета по лабораторной работе №3 за ПК

Цифровая экономика. Цифровые технологии и цифровые услуги.		
<b>Тема 2.2</b> <b>Научные поисковые системы и платформы.</b> Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных.	11	Оформление отчета по лабораторной работе №4 за ПК
<b>Раздел III. Цифровые компетенции: информационная грамотность</b>		
<b>Тема 3.1</b> <b>Цифровые компетенции (для любой сферы). Социальные сети. Цифровой след. Работа с информацией в сети.</b> Управление данными, информацией и цифровым контентом. Возможности текстового редактора для подготовки и оформления документации. Связь и сотрудничество: виды взаимодействия с использованием цифровых технологий, обмен цифровыми технологиями.	6	Оформление отчета по лабораторной работе №4 за ПК
<b>Тема 3.2</b> <b>Компьютерная грамотность: просмотр, поиск и фильтрация данных, информации и цифрового контента. Оценка, анализ данных, информации и цифрового контента.</b> Участие в общественной жизни и сотрудничество с использованием цифровых технологий. Соблюдение сетевого этикета. Управление цифровыми идентификаторами. Интеграция и изменение цифрового образовательного контента. Авторские права и лицензия. Элементы программирования при разработке банка данных. Составление банка данных по направлению исследований.	4	Оформление отчета по лабораторной работе №5 за ПК

### 5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины, выполняемые обучающимися самостоятельно

#### *Методические указания к выполнению лабораторной работы* *Поиск информации в сети Интернет*

Цель работы: Освоить навыки эффективного и безопасного поиска в сети Интернет  
Рассматриваемые вопросы:

1. Работа в Google и его приложениях ([www.google.ru](http://www.google.ru))
2. Яндекс ([www.yandex.ru](http://www.yandex.ru))
3. Рамблер ([www.rambler.ru](http://www.rambler.ru))
4. Библиотечных системах (<https://www.elibrary.ru/>; <http://www.studentlibrary.ru/>)

Требуется зарегистрироваться в библиотечных системах и осуществить следующие поисковые запросы в Google Scholar по темам:

1. ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ЗАКОН ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ: 150 ЛЕТ РАЗВИТИЯ (статья академика РАН Золотова Ю.А.)
2. В поисках частицы Бога, или Охота на бозон Хиггса (статья открытого доступа д.б.н., научного обозревателя Иэна Сэмпла)
3. Титов, Л. Г. Неорганическая химия. Сборник задач повышенной сложности / Титов Л. Г., Чижова И. Н. , под ред. В. И. Деляна. - Москва : МИСиС, 2010. - 43 с. - ISBN 978-5-87623-332-5. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL : <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785876233325.html>; (Проверить доступ - должен быть открыт!!!)
4. Силантьева, А. В. Когнитивные технологии в информатике: учебное пособие / А. В. Силантьева, Н. Б. Толпинская, О. А. Орешкина, В. И. Неземский; под ред. А. Г. Станевского. - Москва:

Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2014. - 72 с.  
<https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785703837597.html>; (Проверить доступ - должен быть открыт!!!)

5. Калыгин, В. Г. Безопасность жизнедеятельности. Промышленная и экологическая безопасность, безопасность в техногенных чрезвычайных ситуациях. Курс лекций / В. Г. Калыгин, В. А. Бондарь, Р. Я. Дедеян - Москва: КолосС, 2013. - 520 с.  
<https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5953202210.html>; (только проверить: доступ должен быть открыт!!!)

**Методические указания по составлению аннотированного списка  
 «Профильные электронные базы данных»**

Аннотированный список «Профильные электронные базы данных» оформляется в тетради, может быть представлен в табличной форме следующего вида:

Химические БД	Биологические БД	Фармакологические БД	Химико-технологические БД
<i>Название и электронный адрес БД?</i>			
<i>Количество сведений (хим.соедин.) в БД?</i>			
<i>Типовой протокол о структуре, составе и др. сведений?</i>			
...	...	...	...
...	...	...	...

Элементы столбцов в Publisher могут быть представлены отдельными страницами. Студенту предоставляется возможность самостоятельно проработать вариант представления аннотированного списка. Оформляется студентами самостоятельно и сдается перед следующей лабораторной работой.

Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме отчетов лабораторных работ. Каждый студент на занятиях получает комплект заданий лабораторной работы для выполнения в аудитории, оснащенной рабочими компьютерами и для дальнейшей самостоятельной проработки.

**Методические указания для составления отчета  
 по компьютерному химическому практикуму**

1. Цель и задачи.
2. Краткое описание работы: виды, приемы, способы, методики исследования и теоретические положения.
3. Результаты, полученные в ходе работы, должны быть сведены в соответствующие таблицы в электронном виде.
4. Анализ полученных результатов.
5. Выводы и ответы на вопросы к работе

Работа считается выполненной, если представлены все этапы лабораторной, составлены зависимости, сделаны соответствующие выводы.

**Методические указания к выполнению лабораторной работы  
 «Научно-правовая база: защита интеллектуальной собственности»**

1. Осуществить поиск заявок на сайте ФИПС и установить их статус по следующим запросам:
  - медицинские маски;
  - биоразлагаемые материалы;
  - ЧПУ станок;
  - программа по химии;
  - товарный знак Familia
2. Составить обзор по найденной информации.

### **Методические рекомендации**

Патентный обзор должен быть оформлен в формате .docx (.doc). Шрифт = Times New Roman, 12 пт; Поля (верхнее : нижнее : левое : правое) = 2:2:2:2 см; Интервал = одинарный; перед/после = 0/0 пт

#### **Методические указания для составления отчета по лабораторной работе**

1. Цель и задачи
2. Краткое описание работы: виды, приемы, способы, методики исследования
3. Результаты, полученные в ходе работы, должны быть сведены в соответствующие таблицы в электронном виде.
4. Анализ полученных результатов
5. Выводы и ответы на вопросы к работе

Работа считается выполненной, если представлены все этапы лабораторной, составлены зависимости, сделаны соответствующие выводы.

## **6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

При реализации различных видов учебной работы по дисциплине возможно применение в том числе электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки / специальности реализация компетентностного подхода предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (мини-опросы, компьютерное моделирование при реализации вычислительного практикума, разбор конкретных модельных ситуаций во внеурочной работе) с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся.

В рамках учебного курса предусмотрены открытые видеоконференции, лекции и мастер-классы с представителями других ВУЗов с целью получения новых умений в рамках изучаемой дисциплины.

### **6.1. Образовательные технологии**

С целью формирования и развития профессиональных навыков у обучающихся в учебном процессе по дисциплине “Компьютерная химия” предусмотрены следующие активные и интерактивные формы проведения лабораторных занятий:

- индивидуальная работа с применением компьютерных технологий (работа на ПК);
- самостоятельная работа студентов;
- учебные дискуссии с подготовкой презентаций на заданную тему.

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и/или off-line в формах: видеолекций, лекций-презентаций, видеоконференции, собеседования в режиме чат, форума, чата, выполнения виртуальных практических и/или лабораторных работ и др.

Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
<b>Раздел I. Введение в дисциплину: электронные базы данных, информационно-справочные и поисковые системы</b>			
<i>Тема 1.</i> Компьютерная химия – важный жизненный навык. Элементы цифровой грамотности и базовые компетенции	Интерактивная лекция	Не предусмотрено	Выполнение задания за ПК

личности.			
<i>Тема 2.</i> Цифровые инструменты для организации командного взаимодействия и совместной деятельности. Сервисы, платформы для организации и проведения веб-конференций и вебинаров.	Интерактивная лекция	Не предусмотрено	Выполнение задания за ПК
<b>Раздел II. Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных</b>			
<i>Тема 1.</i> Практические методы поиска и анализа информации в Интернете. Интернет-технологии поиска информации.	Интерактивная лекция.	Не предусмотрено	Выполнение задания за ПК
<i>Тема 2.</i> Научные поисковые системы и платформы.	Интерактивная лекция.	Не предусмотрено	Выполнение задания за ПК
<b>Раздел III. Цифровые компетенции: информационная грамотность</b>			
<i>Тема 1.</i> Цифровые компетенции (для любой сферы). Социальные сети. Цифровой след. Работа с информацией в сети.	Интерактивная лекция.	Не предусмотрено	Выполнение задания за ПК
<i>Тема 2.</i> Компьютерная грамотность: просмотр, поиск и фильтрация данных, информации и цифрового контента. Оценка, анализ данных, информации и цифрового контента.	Интерактивная лекция.	Не предусмотрено	Выполнение задания за ПК

## 6.2. Информационные технологии

Информационные технологии, используемые при реализации различных видов учебной и внеучебной работы:

- использование возможностей Интернета в учебном процессе (использование информационного сайта преподавателя (рассылка заданий, предоставление выполненных работ, ответы на вопросы, ознакомление учащихся с оценками и т.д.));
- использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронные библиотеки, журналы и т.д.) как источников информации;
- использование возможностей электронной почты преподавателя ([zoloto.chem@mail.ru](mailto:zoloto.chem@mail.ru) или [nv.zolotareva@asu-edu.ru](mailto:nv.zolotareva@asu-edu.ru));
- использование средств представления учебной информации (электронных учебных пособий и практикумов, применение новых технологий для проведения очных (традиционных) лекций и семинаров с использованием презентаций и т.д.);
- использование интегрированных образовательных сред, где главной составляющей являются не только применяемые технологии, но и содержательная часть, т.е. информационные ресурсы (доступ к мировым информационным ресурсам, на базе которых строится учебный процесс);
- использование виртуальной обучающей среды (LMS Moodle «Электронное образование») или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

## 6.3. Программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

### 6.3.1. Программное обеспечение

Microsoft Office 2013 (Пакет офисных программ);

Microsoft Windows 7 Professional (Операционная система);

Adobe Reader (Программа для просмотра электронных документов);  
 SciLab (Пакет прикладных математических программ)  
 Moodle (Образовательный портал ФГБОУ ВО «АГУ»)  
 Google Chrome (Браузер)  
 Notepad++ (Текстовый редактор)

### **6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы**

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>  
 Имя пользователя: AstrGU  
 Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu-edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu-edu.ru/>
4. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек <http://mars.arbicon.ru>
5. Электронная библиотечная система IPRbooks [www.iprbookshop.ru](http://www.iprbookshop.ru)
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» [www.biblio-online.ru](http://www.biblio-online.ru), <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu-edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru) Регистрация с компьютеров АГУ
10. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>
11. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru>
12. Министерство просвещения Российской Федерации <https://edu.gov.ru>

## **7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

### **7.1. Паспорт фонда оценочных средств**

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Компьютерная химия» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин (модулей) и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой разделов, тем.

**Таблица 6 - Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств**

Контролируемый раздел, тема дисциплины (модуля)	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
<b>Раздел 1. Введение в дисциплину: электронные базы данных, информационно-справочные и поисковые системы</b>		
Тема 1.1 Основы математического моделирования. Планирование эксперимента	<i>ПК-1, ПК-2</i>	Отчет лабораторной работы №1
Тема 1.2 Инновационные технологии в математическом моделировании. Примеры построения математических моделей химических реакций	<i>ПК-1, ПК-2</i>	Отчет лабораторной работы №2
<b>Раздел II. Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных</b>		
Тема 2.1 Практические методы поиска и анализа информации в Интернете. Интернет-технологии поиска информации.	<i>ПК-1, ПК-2</i>	Отчет лабораторной работы №3
Тема 2.2 Научные поисковые системы и платформы.	<i>ПК-1, ПК-2</i>	Отчет лабораторной работы №4
<b>Раздел III. Цифровые компетенции: информационная грамотность</b>		
Тема 3.1 Цифровые компетенции (для любой сферы). Социальные сети. Цифровой след. Работа с информацией в сети.	<i>ПК-1, ПК-2</i>	Отчет лабораторной работы №5
Тема 3.2 Компьютерная грамотность: просмотр, поиск и фильтрация данных, информации и цифрового контента. Оценка, анализ данных, информации и цифрового контента.	<i>ПК-1, ПК-2</i>	Отчет лабораторной работы №6

**7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания****Таблица 7 - Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний**

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	-дается комплексная оценка предложенной ситуации; -демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их анализировать и применять; - последовательное, правильное выполнение всех видов заданий; -умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы; -привлекать дополнительную информацию, которая включает обзор научной литературы (журналы, материалы конференций и др.) с последующим описанием; -умение работать как в коллективе, так и самостоятельно.
4 «хорошо»	-дается комплексная оценка предложенной ситуации; -демонстрируются глубокие знания теоретического материала и умение их применять; - последовательное, правильное выполнение предложенных заданий; -возможны единичные ошибки, исправляемые самим студентом после замечания преподавателя;

	-умение обоснованно излагать свои мысли, делать необходимые выводы; -умение работать в коллективе, так и самостоятельно.
3 «удовлетворительно»	-затруднения с комплексной оценкой предложенной ситуации; -неполное теоретическое обоснование, требующее наводящих вопросов преподавателя; -выполнение заданий при подсказке преподавателя; - затруднения в формулировке выводов; -умение работать в коллективе, так и самостоятельно.
2 «неудовлетворительно»	- неправильная оценка предложенной ситуации; -отсутствие теоретического обоснования выполнения заданий;

**Таблица 8 - Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений**

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	-демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, - последовательно и правильно выполняет задания, -умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	-демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, -последовательно и правильно выполняет задания, -умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, -допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	-демонстрирует отдельные, - несистематизированные навыки, -не способен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, -испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, -выполняет задание при подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	-не способен правильно выполнить задание

### **7.3. Контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения по дисциплине**

Ниже приводятся задания лабораторного компьютерного практикума и вопросы для самоконтроля, над которыми целесообразно работать при изучении основного материала, также приведен перечень вопросов к зачету.

#### ***Тема «Компьютерная химия – важный жизненный навык. Элементы цифровой грамотности и базовые компетенции личности»***

##### ***Лабораторная работа №1 Поиск информации в сети Интернет***

Цель работы: Освоить навыки эффективного поиска в сети Интернет

Рассматриваемые вопросы:

Работа в Google ([www.google.ru](http://www.google.ru)) и в приложениях Google

Яндекс ([www.yandex.ru](http://www.yandex.ru))

Рамблер ([www.rambler.ru](http://www.rambler.ru))

Библиотечных системах (<https://www.elibrary.ru/>; <http://www.studentlibrary.ru/>)

Основные понятия:

Поиск информации в Интернете осуществляется с помощью специальных программ, обрабатывающих запросы — информационно-поисковых систем (ИПС).

Существует несколько моделей, на которых основана работа поисковых систем, но исторически две модели приобрели наибольшую популярность — это поисковые каталоги и поисковые указатели. Поисковые каталоги устроены по тому же принципу, что и тематические каталоги крупных библиотек. Они обычно представляют собой иерархические гипертекстовые меню с пунктами и подпунктами, определяющими тематику сайтов, адреса которых содержатся в данном каталоге, с постепенным, от уровня к уровню, уточнением темы.

Поисковые каталоги создаются вручную. Высококвалифицированные редакторы лично просматривают информационное пространство WWW, отбирают то, что, по их мнению, представляет общественный интерес, и заносят в каталог. Основной проблемой поисковых каталогов является чрезвычайно низкий коэффициент охвата ресурсов WWW. Чтобы многократно увеличить коэффициент охвата ресурсов Web, из процесса наполнения базы данных поисковой системы необходимо исключить человеческий фактор — работа должна быть автоматизирована. Автоматическую каталогизацию Web-ресурсов и удовлетворение запросов клиентов выполняют поисковые указатели.

Работу поискового указателя можно условно разделить на три этапа: - сбор первичной базы данных. Для сканирования информационного пространства WWW используются специальные агентские программы — черви, задача которых состоит в поиске неизвестных ресурсов и регистрация их в базе данных; - индексация базы данных.

первичная обработка с целью оптимизации поиска. На этапе индексации создаются специализированные документы — собственно поисковые указатели; - рафинирование результирующего списка. На этом этапе создается список ссылок, который будет передан пользователю в качестве результирующего. Рафинирование результирующего списка заключается в фильтрации и ранжировании результатов поиска. Под фильтрацией понимается отсев ссылок, которые нецелесообразно выдавать пользователю (например, проверяется наличие дубликатов). Ранжирование заключается в создании специального порядка представления результирующего списка (по количеству ключевых слов, сопутствующих слов и др.).

### **Задание 1. Заполните таблицу запросов.**

Поскольку каждый поисковый ресурс, имея общие принципы построения, обладает своими особенностями, рассмотрите возможные варианты поиска:

Ключевая фаза Результаты поиска

Google Yandex Rambler

Цифровое общество

Цифровизация

Информатизация

### **Задание 2. Эффективный поиск в Google**

В поисковой системе Google выполните следующие упражнения:

Поиск фразы целиком. Если взять текст в кавычки, то Google будет искать фразу с точно таким же порядком слов.

Поиск пропущенного слова. Когда нужно найти пропущенное в цитате слово, просто возьмите всю фразу в кавычки и вместо нужного слова поставьте звездочку.

Оператор «site». Если необходимо найти информацию на определенном сайте, воспользуйтесь оператором «site:», поставьте две точки и введите интересующий запрос.

Сужение поиска с помощью символа амперсанд «&» можно искать сразу два слова, которые будут стоять в одном предложении.

Исключение слова из поиска. Например, необходимо найти рецепт диетического десерта, и он обязательно должен быть без сахара. Напишите запрос и поставьте минус перед словом сахар.

Поиск приемлемой цены. Поиск товаров в определенном диапазоне цен. Введите название товара и диапазон цен через две точки (120..300).

Документы в определенном формате. Введите оператор «filetype» и через две точки напишите название заветного формата.

### Задание 3. Поиск информации по формату может работать и без оператора « filetype ».

Проведите поиск презентации на тему «Цифровая химия».

Калькулятор. В строке поиска можно получить результат запроса и калькулятор для дальнейшей работы.

Переводчик. Перед фразой, которую следует перевести, введите «translate», а после — «into» и желаемый язык.

Определения значения слова. Для того, чтобы получить развернутое определение неизвестного слова, воспользуйтесь оператором «define:».

Конвертер величин.

Расписание киносеансов

Точное время

Расширенный поиск в Google

## Тема 1.2 Цифровые инструменты для организации командного взаимодействия и совместной деятельности. Сервисы, платформы для организации и проведения веб-конференций и вебинаров.


### Лабораторная работа №2 «Совместное управление документами посредством «облачного» сервиса Google Docs»


#### Вход в систему

Для того, что получить доступ к возможностям «облачного» сервиса Документы Google (англ. Google Docs), необходимо пройти процедуру регистрации, если этого не было сделано ранее. Для регистрации следует открыть главную веб-страницу поисковой системы Google ([www.google.ru](http://www.google.ru)) и в верхней части страницы выбрать команду «Войти», в открывшейся новой странице выбрать ссылку «Создать аккаунт». Откроется форма для регистрации нового пользователя.

#### Создание текстового документа

Для создания первого совместного текстового документа следует открыть главную страницу поисковой системы Google, нажав кнопку «Вперед» или перейдя по адресу [www.google.ru](http://www.google.ru). В

верхней части страницы следует выбрать команду «Сервисы» , перейдя по ссылке далее. Откроется дополнительное меню, в котором необходимо выбрать ссылку «Документы».

Для создания документов в нижней правой части окна нажмите кнопку «Создать документ» . Откроется новый, пустой текстовый документ. Знакомые всем функции копирования, вырезания и вставки реализуются при помощи команды меню «Правка» или посредством сочетания клавиш:

**<Ctrl+C> – копирование, <Ctrl+X> – вырезать, <Ctrl+V> – вставить.**

Данные сочетания активны во всех веб-приложениях Google Docs. Пользовательский интерфейс будет содержать следующие клавиши ввода:

- |   |  |
|---|--|
| 1. Вывод документа на печать.   | 14. Вставка гиперссылки в документ.  |
| 2. Отмена последнего действия.  | 15. Вставка рисунка в документ (для вставки в документ специальных символов следует выбрать команду меню <i>Вставка</i> → <i>Специальные символы</i> , чтобы вставить номера страниц выберите команду меню <i>Вставка</i> → <i>Номер страницы</i> ). |
| 3. Повтор последнего действия.  |  |
| 4. Копирование выделенного фрагмента текста.                                | 16. Создание нумерованного списка.   |
| 5. Выделение цветом форматирования.   | 17. Создание маркированного списка.  |
| 6. Форматирование выделенного текста в виде заголовка (доступно 6 уровней). | 18. Уменьшить отступ (табуляция).  |
| 7. Выбор шрифта.  | 19. Увеличить отступ.  |
| 8. Выбор размера шрифта.  | 20. Выравнивание текста по левому краю.  |
| 9. Выделение полужирным шрифтом.  |  |
| 10. Выделение курсивом.   |  |
| 11. Выделение подчеркнутым шрифтом.   |  |
| 12. Цветовое оформление текста.   |  |

- |                                      |  |
|--------------------------------------|--|
| 13. Цветовое оформление фона текста. | 21. Выравнивание текста по центру.       |
|                                      | 22. Выравнивание текста по правому краю. |

Сохранность введенных данных обеспечивается постоянно, любая информация автоматически сохраняется в виде мгновенной копии. Таким образом, можно вернуться к одному из первоначальных состояний. Просмотр истории изменений осуществляется при помощи команды меню *Файл* → *Просмотреть историю изменений*.

Наконец, основное достоинство «облачных» сервисов – возможность совместной продуктивной работы над документами. Вы можете позволить вашим соавторам просматривать ваши документы, а при желании и редактировать данные. Для предоставления общего или избирательного доступа к редактируемому файлу нажмите кнопку «Настройки доступа», расположенную в правом верхнем углу веб-интерфейса программы. После присвоения имени новому документу откроется диалоговое окно «Совместный доступ», при помощи элементов управления которого вы можете настроить права доступа к редактируемому документу. Это же окно открывается при выборе команды *Файл* → *Совместный доступ...*

### ***Задание по совместному созданию текстового документа (работа в парах)***

1. Разбейтесь на пары: один студент будет являться автором документа, второй - соавтором. Автор создает документ и открывает доступ соавтору. Создайте совместными усилиями, находясь на двух рабочих местах, один документ, содержащий текст об открытии химического элемента, сводные таблицы с параметрами, формулы, рисунки и графики.
2. Созданные при помощи «облачного» сервиса файлы можно загрузить на локальный компьютер с целью дальнейшего редактирования в офлайн режиме. Сохраните созданный документ на своем дисковом пространстве или flash-носителе, задав команду *Файл* → *Скачать как*, далее выбрав требуемый формат (например, Microsoft Word).
3. Вы можете отправить редактируемый документ как вложение в сообщении электронной почты. Для этого выберите команду меню *Файл* → *Прикрепить к сообщению эл. почты*. Откроется диалоговое окно «Отправка сообщения», в котором вам следует указать электронные адреса получателей (обязательно), а также ввести тему и текст отправляемого сообщения.
4. Вы можете загрузить на сервер провайдера документ, созданный на локальном компьютере. В дальнейшем вы сможете редактировать ваш документ при помощи приложения «Документы Google». Для загрузки документа, созданного на локальном компьютере, следует выбрать команду *Файл* → *Открыть...* → пункт меню *Загрузка*. Далее перетащите файл с локального диска методом Drag-and-Drop или щелкните по кнопке «Выберите файл на компьютере». Все созданные, а также загруженные вами файлы находят свое отражение на вашей главной странице Google Docs, открывающейся при щелчке по значку «Главная страница Google Документов», расположенного в верхнем левом углу окна. Для открытия, удаления, переименования ваших файлов используйте команды контекстного меню.
5. Предъявите на проверку преподавателю:
  1. совместно созданный текстовый документ в Google Docs;
  2. сохраненную версию на локальном диске;
  3. отправленный на свою электронную почту файл;
  4. загруженный в Google Docs с локального диска произвольный текстовый документ.

### **Создание табличного документа**

Для создания новой таблицы следует на главной странице Google Docs в меню выбрать документ *Таблицы*. Пользовательский интерфейс будет содержать основные разделы:

- |                                      |                                      |
|--------------------------------------|--------------------------------------|
| 1. Печать таблицы.                   | 12. Цветовое оформление текста.      |
| 2. Отмена последнего действия.       | 13. Цветовое оформление фона текста. |
| 3. Повтор последнего действия.       | 14. Придание границ таблице.         |
| 4. Копирование выделенного диапазона | 15. Выравнивание текста в ячейках.   |


- |   |   |
|---|---|
| ячеек.  | 16. Объединение ячеек.  |
| 5. Выделение цветом форматирования.   | 17. Перенос по словам.  |
| 6. Денежный формат.   | 18. Вставка функции в ячейку.   |
| 7. Процентный формат.   | 19. Вставка диаграммы в ячейку (при помощи команды меню «Вставка» можно помещать в таблицу рисунки скрипты и т.д.). |
| 8. Другие форматы.  | 20. Фильтрация данных.  |
| 9. Размер шрифта (Выбрать другой шрифт можно при помощи команды меню «Формат» - «Шрифт»).               | 21. Строка формул.  |
| 10. Выделение полужирным начертанием.   | 22. Добавление нового листа в таблицу.  |
| 11. Выделение подчеркнутым начертанием (выбор прочих начертаний осуществляется командой меню «Формат»). | 23. Отражение скрытых листов.   |
|   | 24. Выбор листов таблицы.   |

Как и в случае с программой Excel, ввод формулы начинается с ввода оператора присваивания, который более известен пользователю как знак равенства (=). Ссылки на содержимое других ячеек можно указывать при помощи мыши, просто щелкая мышью по нужной ячейке. При помощи других математических операторов, таких, например, как знак плюс (+), минус (-) и так далее, создайте нужную математическую формулу. Окончание ввода формулы следует обозначить нажатием клавиши <Enter>. Чтобы поместить в ячейку функцию, выберите команду *Вставка* → *Функция* или нажмите кнопку  $\Sigma$  на панели инструментов веб-приложения. Для получения справки по встроенным функциям следует снова нажать кнопку «Функции» и выбрать пункт «Дополнительные функции». Чтобы поместить в таблицу диаграмму, выделите диапазон ячеек, содержащий нужные данные, *Вставка* → *Диаграмма* или нажмите соответствующую кнопку на панели инструментов веб-приложения. Выберите подходящий тип диаграммы, а также укажите другие данные.

### ***Задание по совместному созданию табличного документа (работа в парах)***

1. Создайте совместно усилиями, находясь на двух рабочих местах, один табличный документ, содержащий информацию о физико-химических свойствах соединений, включите вычисляемые функции (молекулярная масса, концентрация, массовая доля и другие параметры).
2. Предъявите на проверку преподавателю:
  1. совместно созданный табличный документ в Google Docs;
  2. сохраненную версию на локальном диске.

### **Создание презентации**

«Облачный» сервис Google Docs содержит веб-приложение для создания и демонстрации презентаций. Для создания презентации следует на главной странице Google Docs в меню выбрать документ *Презентации*. Для создания первой презентации в нижней правой части окна нажмите кнопку «Создать презентацию» . Окно интерфейса содержит следующие блоки:

- |                                   |   |
|-----------------------------------|---|
| 1. Макет создаваемого слайда.     | 20. Выравнивание текста по центру.  |
| 2. Добавить новый слайд.          | 21. Выравнивание текста по правому краю.  |
| 3. Создать копию текущего слайда. | 22. Выравнивание текста по вертикали.   |
| 4. Удалить текущий слайд.         | 23. Очистка ранее созданного форматирования.  |
| 5. Предыдущий слайд.              | 24. Подстрочный текст.  |
| 6. Следующий слайд.               | 25. Надстрочный текст.  |
| 7. Выбор шрифта.                  | 26. Заливка текстового блока.   |
| 8. Выбор размера шрифта.          | 27. Вставка изображения (вставка видео роликов, фигур, а также векторных изображений осуществляется посредством команды меню «Вставить»). |
| 9. Полужирное начертание текста.  |   |
| 10. Курсивное начертание текста.  |   |
| 11. Подчеркнутое начертание.      |   |
| 12. Цветовое оформление текста.   |   |

- |   |  |
|---|--|
| 13. Цветовое оформление фона.           | 28. Вставка текстового блока.                      |
| 14. Вставка ссылки.                     | 29. Копирование выделенного текста в буфер обмена. |
| 15. Создание нумерованного списка.      | 30. Повтор последнего действия.                    |
| 16. Создание маркированного списка.     | 31. Отмена последнего действия.                    |
| 17. Уменьшение отступа.                 | 32. Вывод презентации на печать.                   |
| 18. Увеличение отступа.                 | 33. Принудительное сохранение презентации.         |
| 19. Выравнивание текста по левому краю. |  |

#### ***Задание по созданию презентации***

1. Создайте презентацию на выбранную Вами цифровую тему.
2. Предъявите на проверку преподавателю:
  1. созданную презентацию в Google Docs;
  2. сохраненную версию на локальном диске.

#### **Загрузка документа на Google Диск**

Все файлы, созданные в Google Документах, сохраняются на Google Диске. Его функции включают [хранение файлов в Интернете](#), [общий доступ](#) к ним и совместное редактирование.

В списке сервисов перейдите на Google Диск.

#### **Задание по работе с Google Диском**

1. Загрузите любой файл или несколько файлов с локального диска на ваш Google Диск.
2. Предъявите на проверку преподавателю:
  1. сохраненные ранее и загруженные только что на Google Диск файлы;
  2. в присутствии преподавателя удалите любой файл с Google Диска.

### **Раздел III. Программный инструментарий для сбора, визуализации информации, передачи и обработки данных**

#### ***Тема 2.1 «Практические методы поиска и анализа информации в Интернете. Интернет-технологии поиска информации.»***

##### ***Задание к лабораторной работе №3 Возможности информационного моделирования. Базы данных***

1. Запустите Microsoft Office Access.
2. Создайте новую базу данных: для этого требуется задать имя файла «Литобзор» и сохранить. В зависимости от реализованной версии, сохраняемые файлы могут иметь расширения «.mdb», «.accdb».
3. На вкладке ленты «Создание» в панели инструментов таблицы нажмите на кнопку «Конструктор таблиц».
4. Присвоить название таблице «Книги»: для этого на боковой панели выделить таблицу и выбрать вкладку «Переименовать».
5. В режиме Конструктора введите имена полей и укажите типы данных. В качестве примера, используем следующие данные:

Имя поля	Тип данных
Название книги	Текстовый
Автор	Текстовый
Год издания	Числовой
Число страниц	Числовой
Стоимость	Числовой

Свойство поля типа данных можно корректировать в зависимости от задач, если:

- ✓ выбран текстовый тип данных, то можно ограничить размер поля (max=255 символов);
- ✓ выбран числовой или текстовый тип данных, также можно ввести маску ввода (например, для телефона установим +7(####)##-##-##);
- ✓ тип данных «дата/время», то можно выбрать формат поля для ввода из списка;



ошибок. Оптимально, если разбить такую таблицу на несколько таблиц и установить связи между ними. Для объединения данных в таблицах «Книги», «Издательства», «Читатель», «Выдача» следует задать ключевые поля. Ключ состоит из одного или нескольких полей, значения которых однозначно определяют каждую запись в таблице. Наиболее подходящим в качестве ключевого поля является «Счетчик», так как значения в данном поле являются уникальными (т.е. исключают повторы).

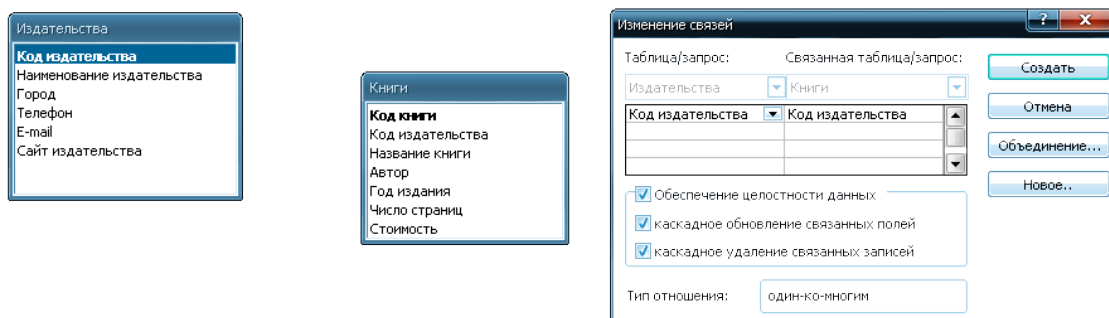
3. Откройте таблицу «Книги» в режиме Конструктора.
4. В таблицу «Книги» введите дополнительный столбец код книги.
5. Нажмите правой кнопкой мыши на поле код книги и в появившемся контекстном меню выберите команду «Ключевое поле». Если в таблице требуется установить несколько ключевых полей, то выделить их можно, удерживая клавишу Ctrl.
6. Аналогично, в таблицу «Читатель» введите дополнительный столбец с ключевым полем код читателя. В таблицу «Издательства» введите дополнительный столбец с ключевым полем код издательства, в таблицу «Выдача» введите дополнительный столбец с ключевым полем код выдачи.
7. При заполнении таблиц с ключевыми полями могут возникнуть некоторые трудности, так как не всегда удается запомнить названия всех издательств и всех читателей с номером кода. Для удобства работы можно создать раскрывающиеся списки с помощью «Мастера подстановок». Откройте таблицу «Издательства» в режиме Конструктора. Для поля код издательства выберите тип данных «Мастер подстановок». В появившемся окне выберите команду «Объект «столбец подстановки» будет использовать значения из таблицы или запроса» и щелкните на кнопку «Далее».
8. В списке таблиц выберите таблицу «Книги» и щелкните на кнопку «Далее».
9. В списке «Доступные поля» выберите поле код издательства и щелкните на кнопку со стрелкой, чтобы ввести поле в список «Выбранные поля». Выберите порядок сортировки списка.
10. В следующем диалоговом окне задайте необходимую ширину столбцов раскрывающегося списка.
11. Установите флажок «Скрыть ключевой столбец» и нажмите на кнопку «Далее».
12. На последнем шаге Мастера подстановок замените при необходимости надпись для поля подстановок и щелкните на кнопку «Готово».
13. Аналогично, создайте раскрывающийся список для поля код читателя в таблице «Выдача».
14. После создания ключевых полей можно приступить к созданию связей. Существует несколько типов отношений между таблицами:
  - ✓ при отношении «один-к-одному» каждой записи ключевого поля в первой таблице соответствует только одна запись в связанном поле другой таблицы, и наоборот. Отношения такого типа используются не очень часто. Иногда их можно использовать для разделения таблиц, содержащих много полей, для отделения части таблицы по соображениям безопасности;
  - ✓ при отношении «один-ко-многим» каждой записи в первой таблице соответствует несколько записей во второй, но запись во второй таблице не может иметь более одной связанной записи в первой таблице;
  - ✓ при отношении «многие-ко-многим» одной записи в первой таблице могут соответствовать несколько записей во второй таблице, а одной записи во второй таблице могут соответствовать несколько записей в первой.
15. Закройте все открытые таблицы, так как создавать или изменять связи между открытыми таблицами нельзя.
16. На главной панели выбрать для начала выбрать вкладку «Работа с базами данных», далее выбрать вкладку «Схема данных». В появившееся поле необходимо добавить все таблицы для редактирования:



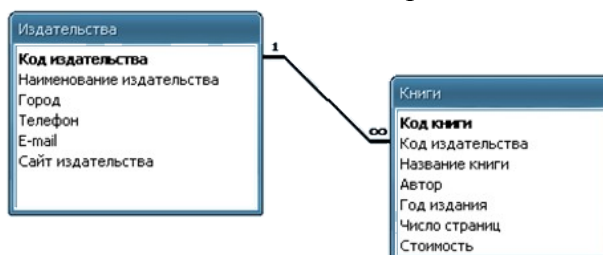
17. Далее, задаем связи между полями отдельных таблиц. Например, «Издательство» может выпускать разные книги, тогда, в режиме «Конструктора», в таблице «книги» необходимо продублировать код издательства. Тип данных определяем «числовой».
18. В окне «Схемы данных» в таблице «Книги» появился внешний код издательства (без ключевого поля):



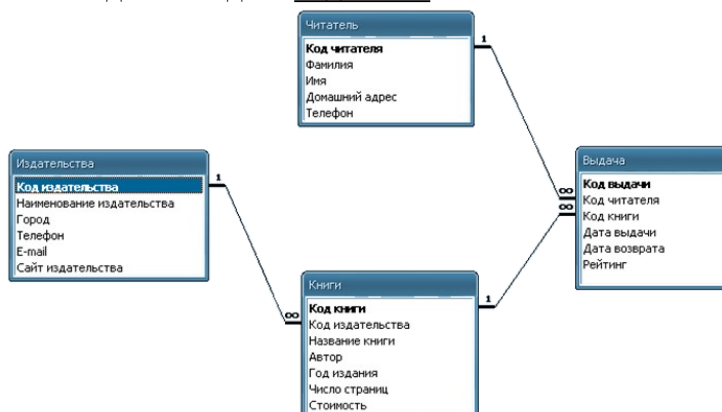
19. Фиксируем связи в таблицах (необходимо перенести левой кнопкой мыши связь от одного поля основного ключа код издательства к другому внешнему ключу код издательства). Необходимо обеспечить целостность данных и обновление:



20. Для этого тип отношения должен быть однозначно определен как «один-ко-многим».



21. Аналогично, создаются связи между таблицами «Читатель» и «Выдача». В таблице «Выдача» создается столбец и сохраняем внешний код читателя. Необходимо отметить, что тип данных и размер поля должен совпадать в связываемых таблицах. Поскольку одна книга может быть выдана несколько раз, также создаются связи между таблицами «Книги» и «Выдача». В таблице «Выдача» необходимо создать код книги.



22. После связывания всех таблиц, необходимо заполнить все поля таблиц данными. Например, заполненная таблица «Издательства» будет иметь вид:

	Код издательства	Наименование издательства	Город	Телефон	E-mail	Сайт издательства
+	1	УРСС	Москва			
+	2	СГТУ	Самара			
+	3	Высшая школа	Москва			
+	4	МГУ	Москва			
+	5	Мысль	Москва			
+	6	Лань	Москва			
	(Счетчик)					

23. Для отображения списка из кода издательства в схеме данных удаляем связь «Издательства» – «Книги», далее, в режиме «Конструктора» в таблице «Книги» напротив кода издательства выбираем «Мастер подстановок». В появившемся окне выбираем таблицу из которой будут использоваться сведения «Издательства», далее ключевыми задаем названия издательств. Необходимо сохранить внесенные изменения. В схеме данных в появившейся связи также задать целостность данных «один-ко-многим». В результате, получим следующий вид:

Код книги	Код издательства	Название книги	Автор	Год издания	Число страниц	Стоимость
+	2	Введение в термический анализ	Егунов В.П.	1996	270 стр.	
+	3	Методы определения основных параметров полупроводн	Павлов Л.П.	1975	288 стр.	
+	4	Нанотехнология. физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов	Суздаев И.П.	2006	592 стр.	
+	5	Моря СССР	Добровольский	2002	189 стр.	
+	6	Каспийское море	Касынов А.Г	2000	400 стр.	
+	7	Моря	Залогин Б.С.	1999	261 стр.	
	(Счетчик)					

Аналогично, в таблице «Выдача» всплывающий список составляется по читателям.

24. Покажите работу преподавателю.

### «Создание запросов в Microsoft Office Access»

Запросы являются основным средством просмотра, отбора, изменения и анализа информации, которая содержится в одной или нескольких таблицах базы данных. Существуют различные виды запросов, наиболее распространенными являются запросы на выборку и, запросы на изменение. Запросы на выборку позволяют осуществлять выбор данных из таблицы и выполнять вычисления с данными. Выделяют следующие категории запросов: простой; на групповые операции; параметрический; перекрестный; на создание таблицы. Запросы на изменение позволяют добавлять или удалять данные из таблиц.

1. Откройте базу данных «Литобзор», созданную ранее.
2. На вкладке ленты «Создание» перейти по вкладке «Мастер запросов». В появившемся окне выберите «Простой запрос».
3. В появившемся диалоговом окне укажите таблицу Книги и выберите поля «Фамилия И.О. автора», «Название книги», «Год издания». Нажмите кнопку «Далее».
4. Введите имя запроса «Год издания книги» и нажмите кнопку «Готово». Появится простой запрос, в котором можно просмотреть соответствие книг по годам издания.
5. Следующий запрос попробуйте создать с помощью Конструктора, для этого выполните команду: вкладка ленты «Создание» переход к «Конструктору запросов».
6. В появившемся окне двойным щелчком мыши выбираете ключевые запросы:

Поле:	Фамилия	Название книги	Автор	Наименование издательства			
Имя таблицы:	Читатель	Книги	Книги	Издательства			
Сортировка:							
Вывод на экран:	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Условие отбора:							
или:							

7. На панели нажать кнопку «Выполнить!». Сформируется таблица с выбранными полями.

Фамилия	Название книги	Автор	Наименование издательства
Семенов	Методы определения основных параметров полупроводн	Павлов Л.П.	УРСС
Семенов	Каспийское море	Касынов А.Г	Мысль
Мосина	Моря СССР	Добровольский	МГУ
Мосина	Нанотехнология. физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов	Суздаев И.П.	Высшая школа
Петров	Нанотехнология. физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов	Суздаев И.П.	Высшая школа
Трофимова	Моря	Залогин Б.С.	Лань
Иванов	Введение в термический анализ	Егунов В.П.	СГТУ

8. Если требуется осуществить выбор из списка, необходимо включить «условие отбора».

Поле:	Фамилия	Название книги	Автор	Наименование изд				
Имя таблицы:	Читатель	Книги	Книги	Издательства				
Сортировка:								
Вывод на экран:	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Условие отбора:				"МГУ"				
или:								

9. Если требуется подсчитать общее количество сведений или осуществить базовые вычисления (групповые операции). Для этого используем на панели знак  $\Sigma$  (выбираете count – подсчет).

Поле:	Наименование изд	Автор	Количество книг:					
Имя таблицы:	Издательства	Книги	Книги					
Групповая операция:	Группировка	Группировка	Count					
Сортировка:								
Вывод на экран:	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Условие отбора:								
или:								

10. Если требуется задать определенный параметр по дате, по значению, по любой ключевой позиции (параметрический запрос): для этого в режиме конструктора запросов во вкладке «условие отбора» задаете [параметр], например, [введите дату], >[30.12.2015].

Поле:	Фамилия	Дата выдачи						
Имя таблицы:	Читатель	Выдача						
Сортировка:								
Вывод на экран:	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Условие отбора:		>[введите дату]						
или:								

11. Если требуется информация о содержании информации в смежных таблицах, о количестве используемой литературы и т.д. (перекрестный запрос). Для этого в режиме конструктора запросов используется «Перекрестный запрос». Задается заголовок строк, заголовок столбцов и значение в каждом из ключевых запросов, например, из таблицы «Книги» выбирается название книги (заголовок строк), автор (заголовок столбцов) из таблицы «Выдача» выбирается код выдачи (присваивается значение).

Поле:	Название книги	Автор	Код выдачи					
Имя таблицы:	Книги	Книги	Выдача					
Групповая операция:	Группировка	Группировка	Count					
Перекрестная таблица:	Заголовки строк	Заголовки столбцов	Значение					
Сортировка:								
Условие отбора:								
или:								

12. Если требуется добавить таблицу с определенными параметрами: для этого в режиме запросов на панели включаете команду «Создание таблиц».

Поле:	Наименование изд	Город	Название книги	Автор	Год издания	Стоимость		
Имя таблицы:	Издательства	Издательства	Книги	Книги	Книги	Книги		
Сортировка:								
Вывод на экран:	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Условие отбора:	"СГУ"							
или:								

13. Если требуется удалить сведения из таблицы, то используем запросы на удаление. Например, требуется из таблицы «Читатель» удалить сведения о «Мосиной Т.П.», для этого достаточно знать код читателя и задать в условии отбора [введите код читателя].

14. Если требуется обновить сведения, например, изменить сведения о переизданных книгах или сведения о повышении или понижении стоимости книги. Для этого используется в режиме запросов команда «Обновление» и вводится в графе обновление, например, все книги уменьшились в стоимости на 20%, тогда, следует задать: [стоимость]–[стоимость]\*0,20.

Код книги	Код издательства	Название книги	Автор	Год издания	Число страниц	Стоимость
2	СГУ	Введение в термический анализ	Егунов В.П.	1996	270 стр.	280 руб.
3	УРСС	Методы определения основных параметров полупроводн	Павлов Л.П.	1975	288 стр.	400 руб.
4	Высшая школа	Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов	Суздаев И.П.	2006	592 стр.	680 руб.
5	МГУ	Моря СССР	Добровольский	2002	189 стр.	192 руб.
6	Мысль	Каспийское море	Касынов А.Г.	2000	400 стр.	504 руб.
7	Лань	Моря	Залогин Б.С.	1999	261 стр.	311 руб.

15. Если требуется добавить сведения в таблицу. Для этого используется запрос на добавление. Например, требуется добавить книгу «Федоров С.С. Компьютерные модели нанокластеров – СПб.: Жасмин. 2014, 312 с.».

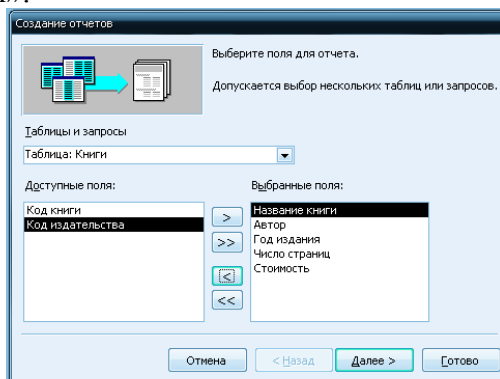
Поле:	Выражение1: [введите название книги]	Выражение2: [введите автора]	Выражение3: [введите год издания]	Выражение4: [введите число страниц]	Выражение5: [введите стоимость]
Имя таблицы:					
Сортировка:					
Добавление:	Название книги	Автор	Год издания	Число страниц	Стоимость
Условие отбора:					
или:					

Код книги	Код издательства	Название книги	Автор	Год издания	Число страниц	Стоимость
2	СГУ	Введение в термический анализ	Егунов В.П.	1996	270 стр.	280 руб.
3	УРСС	Методы определения основных параметров полупроводн	Павлов Л.П.	1975	288 стр.	400 руб.
4	Высшая школа	Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов	Суздаев И.П.	2006	592 стр.	680 руб.
5	МГУ	Моря СССР	Добровольский	2002	189 стр.	192 руб.
6	Мысль	Каспийское море	Касынов А.Г.	2000	400 стр.	504 руб.
7	Лань	Моря	Залогин Б.С.	1999	261 стр.	311 руб.
8	Жасмин	Компьютерные модели нанокластеров	Федоров С.С.	2014	312 стр.	275 руб.

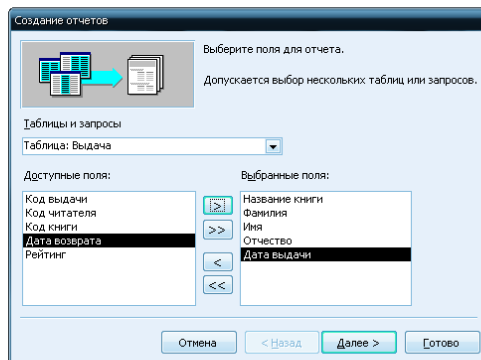
16. Покажите работу преподавателю.

### «Создание отчетов в Microsoft Office Access»

1. Отчеты необходимы для того, чтобы выводить информацию на экран или на печать. Создать отчеты можно несколькими способами: с помощью «Мастера отчетов»; на основе таблиц или запросов; в режиме «Конструктора».
2. Для этого воспользуйтесь на панели управления функцией «Отчет»: на вкладке ленты «Создание» перейти по вкладке «Отчёт». Для редактирования отчета используется «Мастер отчетов».
3. Выберите из списка таблиц (или запрос), которая будет использована как источник данных.
4. В появившемся диалоговом окне «Создание отчетов» переместите все доступные поля в область «Выбранные поля».
5. С помощью «Мастера отчетов» создайте отчет по книгам. В качестве источника данных используйте таблицу «Книги».



6. Для того, чтобы создать комбинированный отчет, содержащий сведения из нескольких таблиц необходимо воспользоваться «Мастером отчетов». Используйте сведения из таблиц «Читатель», «Книги» и «Выдача».



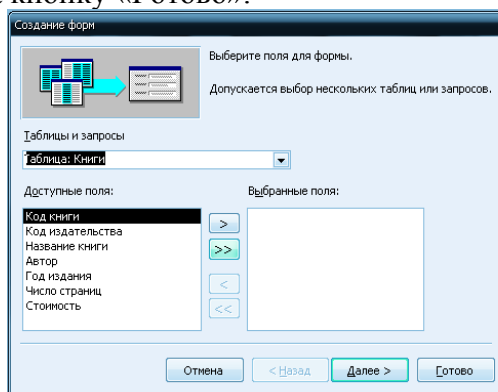
7. Если требуется напечатать почтовые наклейки необходимо выделить таблицу «Книги» и выполнить команду: вкладка ленты «Создание» переход на вкладку «Отчеты» команда «Наклейки».
8. В появившемся диалоговом окне укажите размер наклейки, систему единиц, тип наклейки и нажмите кнопку «Далее».
9. На следующем шаге создания отчета установите шрифт, размер, цвет текста и начертание. Нажмите кнопку «Далее».
10. Выберите поля, которые будут размещаться на наклейке. Например, Название книги, Фамилия, Имя и Отчество. Если на каждой наклейке требуется вывести определенный текст, то введите его в прототип наклейки.
11. При необходимости поменяйте название отчета с наклейками и нажмите кнопку «Готово».
12. Иногда в отчетах требуется вычислять итоговые значения, среднее, минимальное или максимальное значения, а также проценты. Для этого запустите «Мастер отчетов» и в качестве источника данных укажите запрос «Общая сумма по стоимости».

13. В диалоговом окне Мастера, в котором задается порядок сортировки записей, нажмите кнопку «Итоги».
14. В диалоговом окне «Итоги» для поля «Сумма» установите флажки в столбце sum, чтобы посчитать итоговую сумму.
15. Далее выполните все шаги Мастера и нажмите кнопку «Готово».
16. Покажите работу преподавателю.

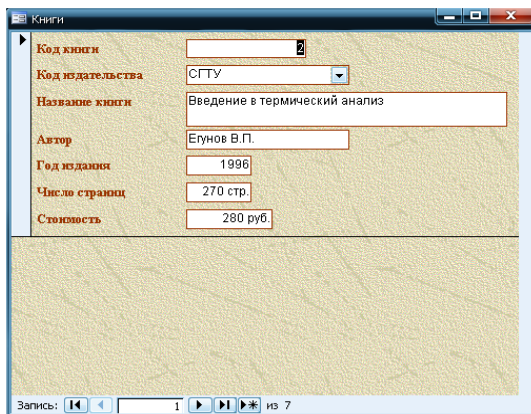
### **«Создание и использование форм в Microsoft Office Access»**

Форма позволяет добавлять, отображать, редактировать сведения, которые хранятся в базе данных. Создавать формы можно с помощью «Мастера форм» по шаблону или с помощью «Конструктора форм». В программе Microsoft Access обычно формы создаются по таблицам, а отчеты по запросам.

1. С помощью мастера форм необходимо создать кнопочную форму таблицы «Книги». Выполните команду: вкладка ленты «Создание» на панели инструментов «Формы» нажмите на вкладку «Другие формы», в появившемся окне выбираете «Мастер форм».
2. В диалоговом окне «Создание форм» выберите таблицы (или запросы) и поля, которые будут помещены в форму. Нажмите кнопку «Далее». В следующих диалоговых окнах мастера выберите внешний вид (в один столбец; ленточный; табличный; выровненный), стиль формы и задайте имя. Нажмите на кнопку «Готово».

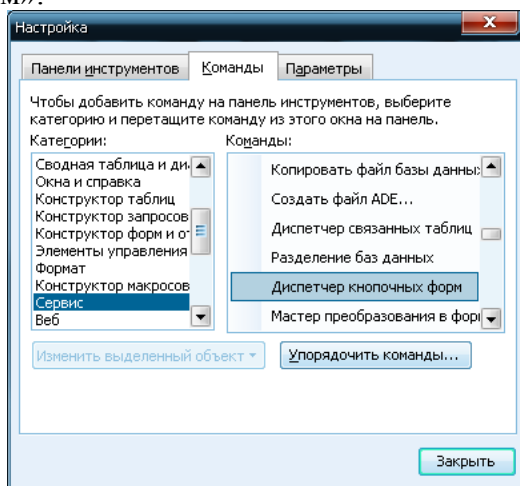


3. Для редактирования, добавления информации или введения дополнительных кнопок в формы необходимо использовать «Конструктор форм», раздел панели инструментов «Элементы управления».

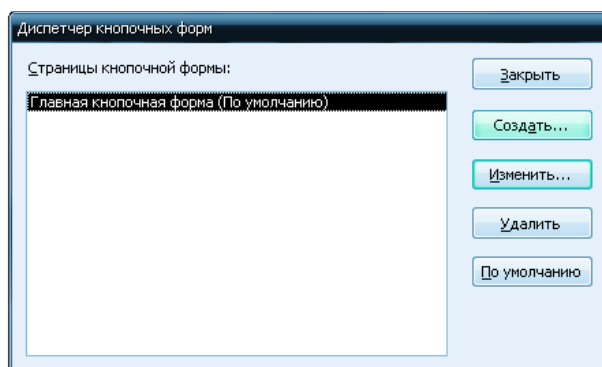


4. В любом месте рабочего пространства формы разместите следующие кнопки: переход вперед-назад по записям в базе данных; выход из формы; добавление информации; печать данных. После того, как нарисуете кнопку указателем, на экране появится диалоговое окно «Создание кнопок». Измените размер, расположение, цвет текста или выберите рисунок, который будет размещаться на кнопке.
5. В последнем диалоговом окне «Мастера кнопок» задайте имя кнопки и нажмите «Готово».
6. Просмотреть процедуру обработки события или скорректировать команду можно с помощью команды «Обработка событий контекстного меню кнопки». Все события записываются на языке Microsoft Visual Basic.

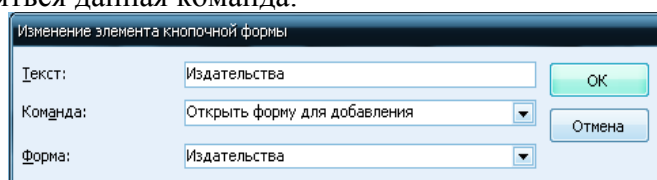
7. В режиме «Конструктора форм» проверьте работоспособность кнопок и корректность заполнения таблицы «Книги».
8. С помощью мастера форм создайте отдельные формы «Издательства», «Читатель», «Выдача».
9. Иногда на форме требуется разместить несколько страниц, содержащих данные из различных источников, справочную или вспомогательную информацию. Для этого можно использовать набор вкладок.
10. Создайте пустую форму.
11. Для добавления к форме набора вкладок щелкните по кнопке «Вкладка» на панели инструментов «Элементы управления». Сначала добавятся только две вкладки с формальными именами «Вкладка 1» и «Вкладка 2».
12. Добавьте еще одну вкладку.
13. Переименуйте названия вкладок так, чтобы на них отображались названия данных, которые будут в них располагаться: «Издательства», «Читатель», «Выдача», «Помощь».
14. Перейдите на вкладку «Издательства» и перетащите на нее мышкой из базы данных форму Издательства. Аналогичную процедуру выполните с другими формами.
15. На вкладку «Помощь» добавьте некоторые советы по работе с базой данных и информацию о разработчиках.
16. Если требуется создать форму с вычисляемым полем для этого потребуется использовать мастер форм. Например, в Издательстве имеется уцененная книга: выбираете данные из двух таблиц «Издательства» и «Книги». Далее, аналогично, добавляете все необходимые кнопки. В режиме Конструктора добавляете нужные поля. В свойствах полей выбираете вкладку «Обработка событий». В появившееся диалоговое окно «Построитель выражений» вводите ключевое выражение на стоимость с 50% уценкой «= [Стоимость] – [Стоимость]\*0,5».
17. В Microsoft Office Access можно создавать кнопочные формы. Кнопочная форма содержит только кнопки и предназначена для выбора основных действий в базе данных. Для создания такой формы необходимо на вкладке ленты «Работа с базами данных» выбрать команду «Диспетчер кнопочных форм».



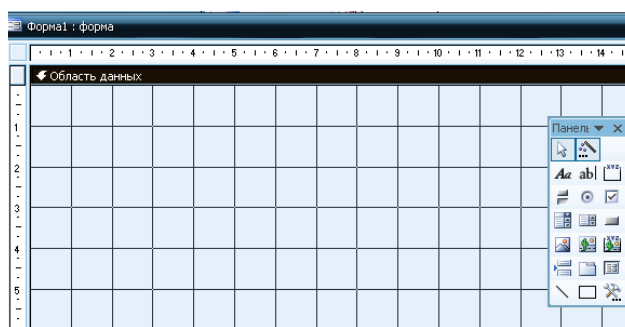
18. Если кнопочной формы в базе данных нет, то будет выведен запрос на подтверждение создания кнопочной формы. В диалоговом окне подтверждения нажмите «Да».
19. В диспетчере кнопочных форм щелкните по кнопке «Создать». В появившемся диалоговом окне введите имя новой кнопочной формы и нажмите «ОК».



20. Имя новой кнопочной формы добавится в список «Страницы кнопочной формы» окна диспетчера кнопочных форм. Выделите имя новой кнопочной формы и щелкните по кнопке «Изменить».
21. В диалоговом окне «Изменение страницы кнопочной формы» щелкните по кнопке «Создать». Появится диалоговое окно «Изменение элемента кнопочной формы».
22. В поле Текст введите текст подписи для первой кнопки кнопочной формы, а затем выберите команду из раскрывающегося списка в поле Команда. В поле Форма выберите форму, для которой будет выполняться данная команда.



23. Аналогичным образом добавьте кнопки «Книги», «Издательства», «Читателю в помощь», «Поиск», «Выход».
24. В диалоговом окне «Диспетчер кнопочных форм» выберите имя вашей кнопочной формы и щелкните по кнопке «По умолчанию».
25. Рядом с названием кнопочной формы появится надпись «(по умолчанию)».
26. Чтобы закончить создание кнопочной формы, щелкните по кнопке «Закреть».
27. Для того чтобы главная кнопочная форма появлялась на экране при запуске приложения, необходимо в главном меню документа нажать на кнопку «Параметры Access». Для текущей базы данных установите форму просмотра – «кнопочная форма».
28. В Microsoft Office Access возможен вариант создания кнопочной формы с использованием «Конструктора форм», в этом случае необходимо самостоятельно конструировать вид кнопочной формы.



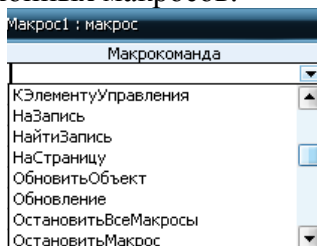
29. Возможно добавление картинок, графических окон, отдельных приложений для построения графиков и многое другое. Разместите на главной кнопочной форме какой-нибудь рисунок, а также, ярлык браузера.
30. Покажите работу преподавателю.

### «Создание макросов в Microsoft Office Access»

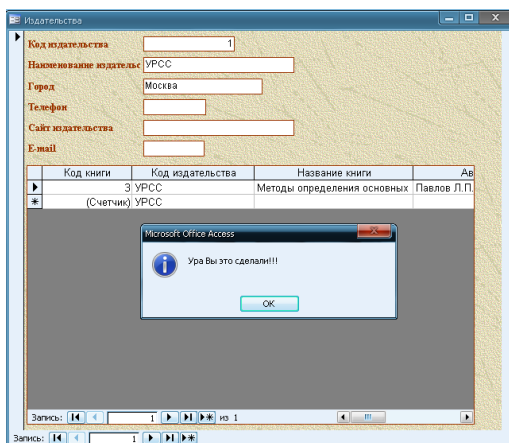
В Microsoft Access существует огромное количество макрокоманд (макросов), которые позволяют автоматизировать процесс за счет выполнения определенных действий. Выделяют:

1. макросы на открытие объектов БД;

2. применение фильтров;
  3. макросы на закрытие объектов БД;
  4. применение свойств к объекту и др.
1. Для создания определенного макроса необходимо перейти по вкладке ленты «Создание» на панели инструментов используйте вкладку «Макрос». В диалоговом окне, в поле макрокоманд представлен полный перечень шаблонных макросов.



2. Если требуется автоматизировать открытие таблицы, используем из перечня команду «Открытие таблицы».
3. Для добавления макрокоманды используется режим «Конструктора». Добавьте команду на открытии отчета о книгах.
4. По аналогии создаете макросы на оставшиеся таблицы «Читатель», «Издательства», «Выдача».
5. Аналогично, создайте макросы на все виды запросов.
6. Задайте макрокоманды на закрытие/открытие форм «Книги» и «Издательства».
7. Для того чтобы, при открытии одной таблицы закрывалась другая, необходимо составить последовательность макросов: «Открыть форму Издательства», «Закрыть таблицу Книги», «Добавить сообщение».




8. Покажите работу преподавателю.

## Тема 2.2 Научные поисковые системы и платформы.

### Задания к лабораторной работе №4 «Построение 3D-поверхностей в Microsoft Office Excel»

Для построения поверхностей используем возможности работы с массивами и абсолютными и смешанными ссылками в Excel. Массив - набор данных, объединенных в группу. Выделяют *одномерные* (элементы массива образуют строку или столбец) или *двумерные* (матрица) массивы.

1. Выделите ячейку с формулой.
  2. В строке формул  выделите ссылку, которую нужно изменить.
  3. Для переключения между типами ссылок нажмите клавишу F4.
- В таблице показано, как изменяется тип ссылки, если формула со ссылкой копируется на две ячейки вниз и на две ячейки вправо.

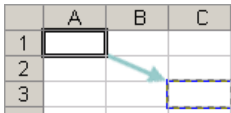
**Копируемая  
формула**

**Первоначальная ссылка**

**Новая ссылка**

\$A\$1 (абсолютный столбец и абсолютная строка)

SA\$1

	A\$1 (относительный столбец и абсолютная строка)	C\$1
	\$A1 (абсолютный столбец и относительная строка)	\$A3
	A1 (относительный столбец и относительная строка)	C3

1. Открыть пустой лист, записать в пустой строке вид функции (например,  $f(x,y)=\sin(x)^2/(a)^2+\cos(y)^2/(b)^2-c$ ), в соседних столбцах задать коэффициенты ( $a, b, c$ , например,  $1, 1, 1$ ), границы построения поверхности (например,  $-1 < x < 1, -1 < y < 1$ ) и шаг (например,  $0,2$ );

2. Задать направления  $x \rightarrow, y \downarrow, z \searrow$  массива, записав значения в выбранных диапазонах:

$z \searrow$	-1	-0,8	-0,6	-0,4	...
-1					
-0,8					
-0,6					
-0,4					
...					

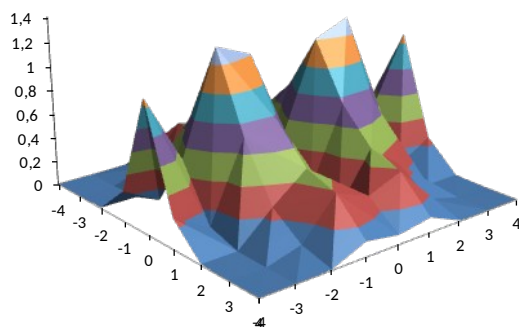
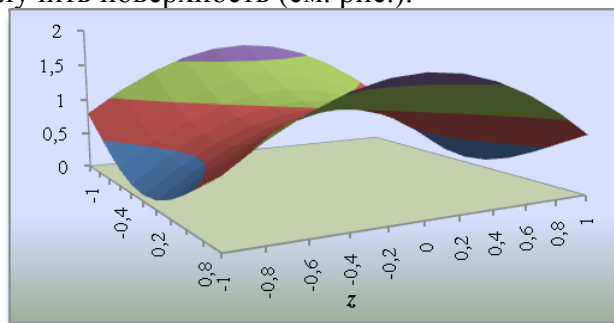
3. В первую пустую строку (-1,-1) вводим формулу, с указанием смешанных и/или абсолютно зафиксированных строк-столбцов, соблюдая правила ввода функций в Excel, например,  $=(\text{SIN}(\text{B}\$4)^2/(\$G\$2)^2)+\text{COS}(\$A5)*2/(\$H\$2)^2-\$I\$2$ ;

4. Протаскиваем результат сначала вдоль оси  $x$ , затем вдоль оси  $y$ :

$z \searrow$	-1	-0,8	-0,6	-0,4	...
-1	0,789	0,595	0,399	0,232	...
-0,8	1,101	0,908	0,712	0,545	...
-0,6	1,359	1,165	0,969	0,802	...
-0,4	1,55	1,357	1,161	0,994	...
...	...	...	...	...	...

5. Выделить массив данных, на панели инструментов перейти по вкладке Вставка  $\rightarrow$  Типы диаграмм (Другие диаграммы) и выбрать вкладку Поверхность;

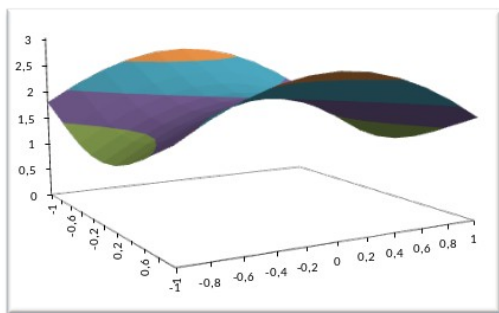
6. В результате, можно получить поверхность (см. рис.).



$$f(x,y) = (a \cdot (\sin(x)^2) + b \cdot (\cos(y)^2)) \cdot \exp\left(-c \cdot \left(\frac{x \cdot y}{4}\right)^2 - d \cdot \left(\frac{y}{4}\right)^2\right)$$

Диапазон: [-1; 1] с шагом 0,2

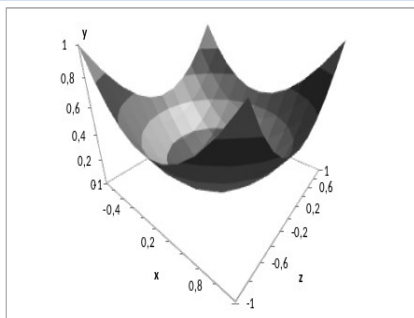
a	b	c	d
1	0,5	1	1



$$f(x, y) = \frac{\sin(x)^2}{(a)^2} + \frac{\cos(y)^2}{(b)^2} - c$$

Диапазон: [-1; 1] с шагом 0,2

a	b	c
1	1	0



$$f(x, y) = \frac{(x)^2}{(a)^2} + \frac{(y)^2}{(b)^2} + \frac{(d)}{c}$$

Диапазоны: [-1; 1] с шагом 0,2

a	b	c	d
1	1	2	0

### **Раздел III. Цифровые компетенции: информационная грамотность**

#### **Тема 3.1 Цифровые компетенции (для любой сферы). Социальные сети. Цифровой след.**

##### **Работа с информацией в сети**

##### **Задание к лабораторной работе №5 Цифровой след в Интернете**

Провести поиск научно-публицистических статей на заданную тему с использованием ресурсов имеющихся в доступной среде.

Тематические вопросы:

Что такое цифровой след в интернете?

Какие цифровые следы мы оставляем в интернете?

Какие есть примеры цифрового следа?

Какие типы цифрового следа существуют?

#### **Тема 3.2 Компьютерная грамотность: просмотр, поиск и фильтрация данных, информации и цифрового контента. Оценка, анализ данных, информации и цифрового контента.**

##### **Задание к лабораторной работе №6 «Пакеты прикладных программ для статистической обработки данных»**

**Цель:** Научиться строить модель линейной регрессии с несколькими влияющими факторами.

Построение линейной регрессионной модели делает возможным осуществлять прогноз и дальнейшее планирование эксперимента. Это наиболее распространенный способ демонстрации закономерности какой-то переменной от других. Модель линейной регрессии имеет вид:

$$Y = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_kx_k$$

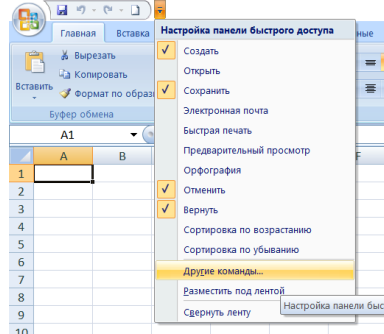
где  $a$  – параметры (коэффициенты) регрессии,  $x$  – влияющие факторы,  $k$  – количество факторов модели.

Исходные данные: числовой набор данных основного параметра  $Y$ , а также количество величин показателей, влияние которых изучается в модели  $X$ .

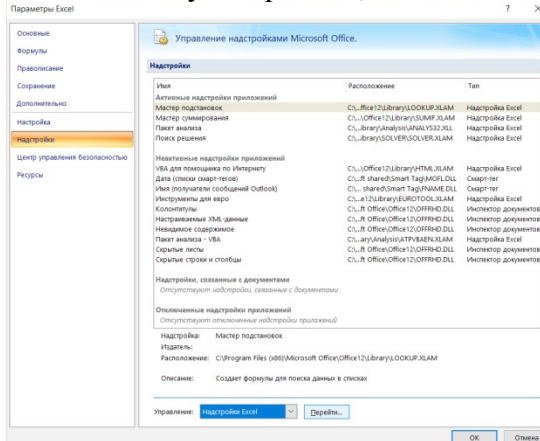
Для построения адекватной линейной модели желательно, чтобы исходные данные не имели сильных перепадов (в таких случаях лучше проводить предварительное сглаживание). Параметры модели линейной регрессии можно рассчитать вручную с помощью Метода наименьших квадратов (МНК) или с применением надстройки (Пакет анализа данных) в Microsoft Office Excel. Этот инструментариум рассчитывает параметры регрессии по методу МНК.

По умолчанию данная надстройка отключена. Для активации пакета необходимо:

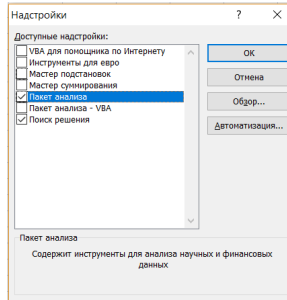
1. В настройках панели быстрого доступа находим вкладку «Другие команды»,



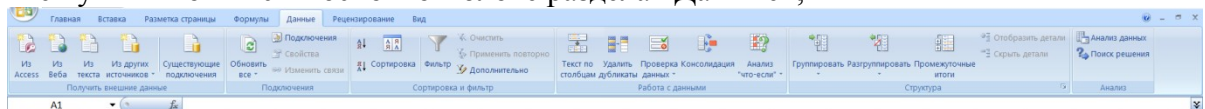
Переходим в «Надстройки» и жмем вкладку «Перейти»,



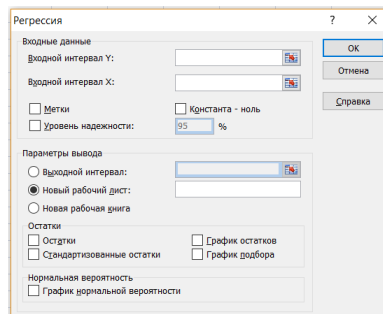
2. В появившемся окне выбираем пункты «Пакет анализа» и «Поиск решения». Жмем «ОК»,



3. Новые пункты появятся в основном блоке раздела «Данные»,



4. В активном окне «Анализ данных» из списка возможностей выбираем «Регрессия» и жмем «Ок»,



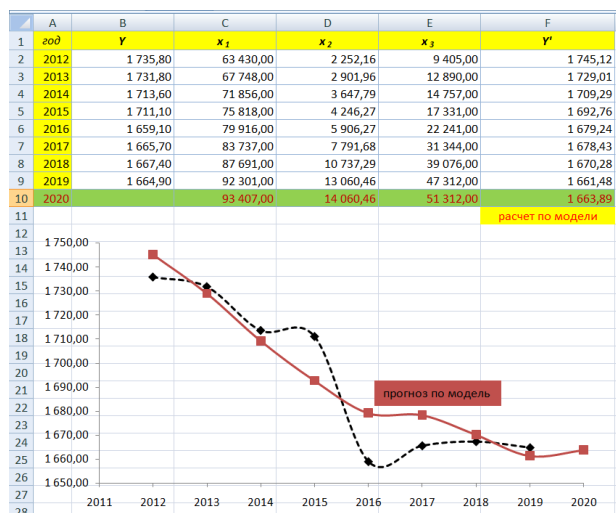
5. В появившемся окне достаточно задать диапазоны исходных данных  $X$  и  $Y$  и нажать кнопку «Ок». Далее, на новом листе появятся результаты расчета в виде итогов,

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Вывод итогов								
2									
3	Регрессионная статистика								
4	Множественный R	0,930210607							
5	<b>R-квадрат</b>	<b>0,865291774</b>							
6	Нормированный R-квадрат	0,764260604							
7	Стандартная ошибка	15,81311704							
8	Наблюдения	8							
9									
10	Дисперсионный анализ								
11		df	SS	MS	F	Значимость F			
12	Регрессия	3	6424,856318	2141,618773	8,56460217	0,032455712			
13	Остаток	4	1000,218682	250,0546704					
14	Итого	7	7425,075						
15									
16		Коэффициенты	Стандартная ошибка	t-статистика	P-Значение	Нижние 95%	Верхние 95%	Нижние 95,0%	Верхние 95,0%
17	Y-пересечение	2079,855305	143,8181951	14,461698	0,000132909	1680,551981	2479,158628	1680,551981	2479,158628
18	Переменная X 1	-0,005611169	0,002402895	-2,335170205	0,079799006	-0,012282676	0,001060337	-0,012282676	0,001060337
19	Переменная X 2	-0,00265813	0,023876647	-0,111327596	0,916719194	-0,068950329	0,06363407	-0,068950329	0,06363407
20	Переменная X 3	0,002767323	0,007395082	0,374211298	0,727239297	-0,017764716	0,023299363	-0,017764716	0,023299363

Ключевыми являются ячейки «R-квадрат» и столбец с коэффициентами уравнения (выделены цветом). Величина 0,8653 – есть  $R^2$  – коэффициент детерминации, который показывает, что на 86,53% расчетные параметры модели, а значит сама модель, объясняют зависимость и изменения изучаемого параметра  $Y$  от исследуемых факторов  $X_i$ .

$R^2$  показатель качества модели, - чем выше, тем лучше.

Коэффициенты модели: 2079,8553 – это  $a_0$  – коэффициент который показывает, какой будет  $Y$  в случае, если все используемые в модели факторы будут равны 0 (это зависимость от других неописанных в модели факторов); -0,0056 –  $a_1$  – коэффициент, который показывает весомость влияния фактора  $x_1$  на  $Y$  (в пределах данной модели параметр не влияет на показатель  $Y$ , низкая степень влияния). Знак минус показывает, что это влияние отрицательно; -0,0027 –  $a_2$  – коэффициент отрицательный, также низкая степень влияния; 0,0028 –  $a_3$  – коэффициент положительный, то есть согласно модели данный параметр является существенным и определяющим.



Рассчитанные коэффициенты запишем в линейную регрессионную модель:

$$Y = 2079,8553 - 0,0056x_1 - 0,0027x_2 + 0,0028x_3$$

Для того, чтобы сделать прогноз на основании модели, достаточно подставить значения влияющих факторов в место соответствующих  $X_i$  в полученном уравнении.

### Перечень вопросов и заданий, выносимых на экзамен / зачёт / дифференцированный зачёт

#### Типовые вопросы к зачету

1. Что такое компьютерная химия и как она отличается от традиционной химии?
2. Какие основные методы моделирования молекул используются в компьютерной химии?
3. Какова роль квантовой химии в компьютерных симуляциях?
4. Что такое метод молекулярной динамики и в каких случаях он применяется?
5. Как современные программные пакеты способствуют развитию компьютерной химии?
6. Какие подходы используются для предсказания 3D-структуры белков с помощью компьютерного моделирования?
7. Как можно использовать модели машинного обучения для предсказания физических или

химических свойств новых соединений на основе имеющихся данных?

8. Как компьютерная химия помогает в разработке новых лекарств?
9. В чем состоит важность вычислительных ресурсов для проведения больших химических расчетов?
10. Какие вызовы существуют при использовании компьютерной химии для изучения сложных химических систем?
11. Каковы перспективы развития компьютерной химии в ближайшие десятилетия?
12. Какие преимущества дает использование баз данных химической информации для поиска структур и свойств химических соединений?
13. Как компьютерные программы для молекулярного моделирования могут помочь в предсказании свойств новых веществ?
14. Как компьютерная обработка данных может улучшить качество анализа спектров (например, ЯМР, ИК, УФ)?
15. Как программное обеспечение для обработки больших данных (Big Data) может быть применено в химическом анализе и исследовании материалов?
16. Как цифровые технологии и компьютеры меняют подходы к обучению химии в университетах и школах?
17. Приведите примеры существующих планировщиков и электронных органайзеров.
18. Файлообменники.
19. Системы управления проектами и индивидуальными задачами в режиме онлайн.
20. Цифровые инструменты для организации совместной работы.
21. Составление ассоциативных карт в процессе обучения.
22. Виртуальные доски в деле.
23. Сервисы, платформы для организации и проведения веб-конференций и вебинаров.
24. Life-Long Learning в VUCA мире.

Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>ПК-2 – Способен выбирать технические средства и методы испытаний (исследований) для решения поставленных задач химической направленности</b>				
1	Задание закрытого типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В чем состоит особенность поля «мемо»?</p> <p>а) имеет ограниченный размер;  б) имеет свойство автоматического наращивания;  в) служит для ввода действительных чисел;  г) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  д) служит для ввода числовых данных</p>	г	1
2		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>В каких элементах таблицы хранятся данные базы:</p> <p>а) в записях;  б) в ячейках;  в) в полях;  г) в столбцах;  д) в строках</p>	б	1
3		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Модель уравнения линейной регрессии имеет вид:</p> <p>а) <math>y = 1/a + b \cdot x + e</math>  б) <math>y = a + b \cdot x + e</math>  в) <math>y = b \cdot x^2 + e</math>  г) <math>y = e^{a + b \cdot x}</math></p>	б	1
4	Задание комбинированного типа	<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для чего в базе данных нужен «счетчик»?</p> <p>а) данные хранятся не в поле, а в другом месте, а в поле хранится только указатель на то, где расположен текст;  б) имеет ограниченный размер;  в) имеет свойство автоматического наращивания;  г) служит для ввода действительных чисел;  д) служит для ввода числовых данных</p>	в	1

#### 7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине

Методические материалы составляют систему текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины (модуля), закрепляют виды и формы текущего контроля, сроки проведения, а также виды промежуточной аттестации по дисциплине (модулю), ее сроки и формы проведения (устный зачет/экзамен, письменный зачет/экзамен и т.п.). В системе контроля указывается процедура оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю) при использовании балльно-рейтинговой системы, показывается механизм получения оценки (из чего складывается оценка по дисциплине (модулю) в соответствии с балльно-рейтинговой системой), основные положения БАРС, указывается система бонусов и штрафов, примерный набор дополнительных показателей.

**Таблица 10 - Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине**

№ пп	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/баллы	Максимальное количество баллов	Срок предоставления
<b>Основной блок</b>				
1	Выполнение лабораторных работ за ПК	6/8	48	по расписанию
2	Отчет лабораторных работ	6/7	42	по расписанию
<b>Всего</b>			90 баллов	
3	Зачет		10 баллов	по расписанию
<b>Итого</b>			<b>100 баллов</b>	<b>ЗАЧЕТ</b>

**Таблица 11 - Система штрафов**

Показатели	Баллы
Опоздание (более двух раз)	-2
Не готов(а) к практической части лабораторных занятий	-3
Нарушение учебной дисциплины	-2
Пропуск лекций без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Пропуск лабораторного занятия без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Нарушение правил техники безопасности	-2

**Таблица 12 – Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по дисциплине (модулю)**

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале	
90–100	5 (отлично)	Зачтено
85–89	4 (хорошо)	
75–84		
70–74		
65–69	3 (удовлетворительно)	Зачтено
60–64		
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)	Не зачтено

При реализации дисциплины (модуля) в зависимости от уровня подготовленности обучающихся могут быть использованы иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

## 8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 8.1. Основная литература

1. Бутырская, Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е. В. Бутырская. - Москва: СОЛОН-ПРЕСС, 2020. - 224 с. (Серия "Библиотека студентов") - ISBN 978-5-91359-095-4. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785913590954.html>
2. Омельченко В.П., Информационные технологии в профессиональной деятельности / Омельченко В.П., Демидова А.А. - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2019. - 432 с. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970450352.html> (ЭБС «Консультант студента»)
3. Боброва И.И., Информационные технологии в образовании / Боброва И.И. - М.: ФЛИНТА, 2019. - 195 с. URL : <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785976520851.html> (ЭБС «Консультант студента»)
4. Золотарева Н.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 86 с.
5. Математические методы решения химических задач: доп. УМО по клас. унив. образованию в качестве учеб. пособия для студентов вузов...по направ. подготовки "Химия" / А.И. Козко и др. - М.: Академия, 2013. - 368 с.
6. Гаврилова З.П. Информационные технологии: учебное пособие / Гаврилова З.П. - Ростов н/Д: Изд-во ЮФУ, 2011. - 90 с. Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785927508938.html>
7. Норенков И.П., Информационные технологии в образовании / Норенков И.П., Зимин А.М. - М.: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2004. - 352 с. (Информатика в техническом университете) - ISBN 5-7038-2434-6 - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN5703824346.html>
8. Фармацевтическая химия: учебник / Под ред. Г. В. Раменской. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 640 с. Систем. требования: Adobe Reader XI; экран 10". - ISBN 978-5-00101-824-7. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001018247.html>

### 8.2. Дополнительная литература

1. Золотарева Н.В. Численные методы анализа в химии: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 78 с;
2. Киселев Г.М., Информационные технологии в педагогическом образовании / Киселев Г. М. - М.: Дашков и К, 2014. - 304 с. URL : <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785394023651.html> (ЭБС «Консультант студента»);
3. Михеева Е.В., Информационные технологии в профессиональной деятельности : учеб. пособие. - М.: Проспект, 2014. - 448 с. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785392123186.html> (ЭБС «Консультант студента»);
4. Наац В.И., Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы [Электронный ресурс] / Наац В.И., Наац И.Э. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. (ЭБС <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922111607.html>);

### 8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины (модуля)

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>  
Имя пользователя: AstrGU  
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu-edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu-edu.ru/>
4. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники

проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек <http://mars.arbicon.ru>

5. Электронная библиотечная система IPRbooks [www.iprbookshop.ru](http://www.iprbookshop.ru)

6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>

7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» [www.biblio-online.ru](http://www.biblio-online.ru), <https://urait.ru/>

8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu-edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ

9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru) Регистрация с компьютеров АГУ

## **9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины включает в себя лекционную аудиторию, оснащенную проекционным оборудованием, экраном, ЭВМ с презентационным ПО и компьютерный класс для проведения вычислительных работ. В учебном процессе для освоения дисциплины используются следующие технические средства – компьютерное, мультимедийное оборудование для проведения практических занятий.

Рабочая программа дисциплины (модуля) при необходимости может быть адаптирована для обучения (в том числе с применением дистанционных образовательных технологий) лиц с ограниченными возможностями здоровья, инвалидов. Для этого требуется заявление обучающихся, являющихся лицами с ограниченными возможностями здоровья, инвалидами, или их законных представителей и рекомендации психолого-медико-педагогической комиссии. Для инвалидов содержание рабочей программы дисциплины (модуля) может определяться также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).