

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Ганеев Винер Валиахметович  
Должность: Директор  
Дата подписания: 24.10.2023 14:58:56  
Уникальный программный ключ:  
fceab25d7092f3bff743e8ad3f8d57fddc1f5e66

**ФГБОУ ВО «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»  
БИРСКИЙ ФИЛИАЛ УУНиТ  
ФАКУЛЬТЕТ БИОЛОГИИ И ХИМИИ**

Утверждено:

на заседании кафедры биологии, экологии и химии  
протокол № от 24.10.2023 г.  
Зав. кафедрой подписано ЭЦП/

Согласовано:

Председатель УМК  
факультета биологии и химии  
подписано ЭЦП /

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)  
для очно-заочной формы обучения**

Компьютерные технологии в химии  
Обязательная часть

**программа бакалавриата**

Направление подготовки (специальность)  
04.03.01 Химия ВО

Направленность (профиль) подготовки  
Нефтехимия и химическая технология

Квалификация  
Бакалавр

Разработчик (составитель) <u>Доцент, к. х.н., доцент</u> (должность, ученая степень, ученое звание)	<u>подписано ЭЦП /Газетдинов Р.Р.</u> (подпись, Фамилия И.О.)
---	--

Для приема: 2020-2021 г.

Бирск г.

Составитель / составители: Газетдинов Р.Р.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры биологии, экологии и химии протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_, протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20 \_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ Ф.И.О/

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_, протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20 \_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ Ф.И.О/

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_, протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20 \_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ Ф.И.О/

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины, утверждены на заседании кафедры \_\_\_\_\_, протокол № \_\_\_\_ от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20 \_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ Ф.И.О/

## Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций.....	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы.....	6
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся).....	6
4. Фонд оценочных средств по дисциплине .....	11
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.....	11
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.....	15
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины .....	21
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.....	21
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины.....	22
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	22

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций**

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
Общепрофессиональные навыки	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники (ОПК-3);	ОПК-3.1. Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
		ОПК-3.2. Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
		ОПК-3.3. Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
Физико-математическая и компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной	ОПК-5.1. Знать и понимать принципы работы современных информационных технологий	Знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований

	деятельности (ОПК-5);		информационной безопасности
		ОПК-5.2. Уметь использовать современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности	Уметь использовать современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности
		ОПК-5.3. Владеть навыками использования современных информационных технологий для решения задач профессиональной деятельности	Владеть навыками использования современных информационных технологий для решения задач профессиональной деятельности

## **2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Компьютерные технологии в химии» относится к обязательной части.

Дисциплина изучается на   2   курсе в   3,4   семестре.

Цель изучения дисциплины: освоение системы базовых знаний, отражающих вклад информатики в формирование современной научной картины мира, роль информационных процессов в обществе, биологических и технических системах. получение правильного и всестороннего представления о возможностях использования компьютерных технологий в химической науке и образовании.

## **3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)**

ФГБОУ ВО «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»  
БИРСКИЙ ФИЛИАЛ УУНиТ  
ФАКУЛЬТЕТ БИОЛОГИИ И ХИМИИ

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ**

дисциплины «Компьютерные технологии в химии» на 3,4 семестр

очно-заочная

форма обучения

<b>Вид работы</b>	<b>Объем дисциплины</b>
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	7/252
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	163.4
лекций	36
практических/ семинарских	0
лабораторных	126
контроль самостоятельной работы (КСР)	0
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) ФКР	1.4
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СРС)	53.8
Учебных часов на подготовку к экзамену, зачету (Контроль)	34.8

Форма контроля:

Зачет 3 семестр

Экзамен 4 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)					Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		Лек	Лаб	Зч	Эк	СР С			
2 курс / 3 семестр									
1	Теоретические основы компьютерных технологий.								
1.1	Теоретические основы компьютерных технологий  Аппаратное и программное обеспечение компьютерных технологий. Современное состояние и развитие ЭВМ и связанных с ними технологий.	6	12			11. 8	Осн. лит-ра № 1 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Тестирование, Лабораторная работа
1.2	Математические методы компьютерного моделирования  Компьютерное моделирование в химии. Ознакомление с пакетом HyperChem 8.0.8.	4	14			8	Осн. лит-ра № 1 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Тестирование, Лабораторная работа
1.3	Методы и средства обработки экспериментальных данных  Методы и средства обработки	4	14			8	Осн. лит-ра № 1 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Тестирование, Лабораторная работа

	экспериментальных данных в химии. Пакет ACDLabs.								
1.4	Визуализация экспериментальных данных  Программы визуализации данных в химии. Пакт BioRadLabs.	4	14			8	Осн. лит-ра № 1 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Лабораторная работа, Тестирование
2	Зачет			1		0.2			
Итого по 2 курсу 3 семестру		18	54	1		36			
2 курс / 4 семестр									
1	Компьютерные технологии в химии.								
1.1	Квантово-химические расчеты в химии.  Программное обеспечение расчетов по методу MO. GAMESS. Gaussian. Dalton. NWChem. HyperChem. Природа.	6	18			4	Осн. лит-ра № 1 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Лабораторная работа, Тестирование
1.2	Интерпретация результатов квантово-химических расчетов.  Программы-интерпретаторы квантово-химических расчетов. ChemCraft. ViewMol3D. Molekel. Molden. GaussView.	4	18			4	Осн. лит-ра № 1 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Тестирование, Лабораторная работа
1.3	Использование сети Интернет для решения задач профессиональной деятельности.  Использование сети Интернет для поиска	4	18			4	Осн. лит-ра № 1 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Лабораторная работа, Тестирование

	профессиональной информации. Информационная безопасность при работе в сети. Программные продукты и базы данных по химии.								
1.4	Компьютерные технологии изучения свойств веществ и химических процессов.  Компьютерные технологии изучения свойств веществ и химических процессов. Расчет биологической активности органических молекул в программе PASS. Использование пакета ACDLabs для изучения свойств веществ.	4	18			6	Осн. лит-ра № 1 Доп. лит-ра № 1	Тестирование	Тестирование, Лабораторная работа
2	Экзамен				1	36			
Итого по 2 курсу 4 семестру		18	72		1	54			
Итого по дисциплине		36	126	1	1	90			

#### 4. Фонд оценочных средств по дисциплине

##### 4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники (ОПК-3);

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения (Зачет)	
		Незачтено	Зачтено
ОПК-3.1. Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Не удовлетворительно знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.2. Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Не удовлетворительно уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.3. Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения	Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств	Не удовлетворительно владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием

свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники		современной вычислительной техники
---	---	--	------------------------------------

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения (Экзамен)			
		2 (Неудовлетворительно)	3 (Удовлетворительно)	4 (Хорошо)	5 (Отлично)
ОПК-3.1. Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Не удовлетворительно знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Удовлетворительно знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Отлично знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.2. Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Не удовлетворительно уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Удовлетворительно уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Хорошо уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Отлично уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
ОПК-3.3. Владеть навыками применения	Владеть навыками применения расчетно-	Не удовлетворительно владеть навыками	Удовлетворительно владеть навыками применения	Хорошо владеть навыками применения	Отлично владеть навыками применения

расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
---	--	--	---	---	---

Код и формулировка компетенции: Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-5);

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения (Зачет)	
		Незачтено	Зачтено
ОПК-5.1. Знать и понимать принципы работы современных информационных технологий	Знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Не удовлетворительно знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Хорошо знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности
ОПК-5.2. Уметь использовать современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности	Уметь использовать современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности	Умения не сформированы	Умения в основном сформированы

ОПК-5.3. Владеть навыками использования современных информационных технологий для решения задач профессиональной деятельности	Владеть навыками использования современных информационных технологий для решения задач профессиональной деятельности	Владение навыками не сформировано	Владение навыками в основном сформировано
--	--	-----------------------------------	---

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения (Экзамен)			
		2 (Неудовлетворительно)	3 (Удовлетворительно)	4 (Хорошо)	5 (Отлично)
ОПК-5.1. Знать и понимать принципы работы современных информационных технологий	Знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Не удовлетворительно знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Удовлетворительно знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Хорошо знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Отлично знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности
ОПК-5.2. Уметь использовать современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности	Уметь использовать современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности	Умения не сформированы	Умения не полностью сформированы	Умения в основном сформированы	Умения полностью сформированы
ОПК-5.3.	Владеть	Владение	Владение	Владение	Владение

Владеть навыками использования современных информационных технологий для решения задач профессиональной деятельности	навыками использования современных информационных технологий для решения задач профессиональной деятельности	навыками не сформировано	навыками неуверенное	навыками в основном сформировано	навыками уверенное
--	--	--------------------------	----------------------	----------------------------------	--------------------

**4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.**

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ОПК-3.1. Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знать расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Лабораторная работа, Тестирование
ОПК-3.2. Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Уметь применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Лабораторная работа
ОПК-3.3. Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Владеть навыками применения расчетно-теоретических методов для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Лабораторная работа
ОПК-5.1. Знать и понимать принципы работы современных информационных технологий	Знать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Тестирование, Лабораторная работа
ОПК-5.2. Уметь использовать	Уметь использовать	Тестирование

современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности	современные информационные технологии для решения задач профессиональной деятельности	
ОПК-5.3. Владеть навыками использования современных информационных технологий для решения задач профессиональной деятельности	Владеть навыками использования современных информационных технологий для решения задач профессиональной деятельности	Тестирование

### Тестовые задания

Описание тестовых заданий: тестовые задания включают тесты закрытого типа (с одним правильным ответом), тесты на установлении последовательности и на установление соответствия. Оценка за выполнение тестовых заданий выставляется на основании процента заданий, выполненных студентами в процессе прохождения промежуточного и рубежного контроля знаний

70. В текстовом процессоре MS Word можно создавать списки следующих типов:

- : основной
- : буквенный
- +: маркированный
- +: нумерованный
- +: многоуровневый

71. К какому типу программ относится программа MS Excel?

- +: электронная таблица
- : текстовый процессор
- : графический редактор
- : табличный редактор

72. Какие типы данных могут содержать электронные таблицы MS Excel

- : числовые, текстовые
- : текстовые, формулы
- : числовые, формулы
- +: числовые, текстовые, формулы

143. В программе HyperChem для начала расчетов методом молекулярной механики в диалоговом окне какую потенциальную функцию для расчетов необходимо выбрать?

- : BIO+
- : Setup
- : OPLS
- +: Force field

144. В программе HyperChem метод MM+ разрабатывался для ...

- : неорганических молекул
- : нуклеиновых кислот
- : биологических макромолекул
- +: органических молекул

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания выполнения тестовых заданий

Описание методики оценивания выполнения тестовых заданий: оценка за выполнение тестовых заданий ставится на основании подсчета процента правильно выполненных тестовых заданий.

**Критерии оценки (в баллах):**

- **9-10** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 81 – 100 %;
- **7-8** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 61 – 80 %;
- **4-6** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 41 – 60 %;
- **до 4** баллов выставляется студенту, если процент правильно выполненных тестовых заданий составляет 40 %;

### Лабораторная работа

Лабораторная работа. Создание полипептидов.

Построение цепи аминокислот

До сих пор Вы учились строить отдельные молекулы и отображать их, читая координаты из файла HIN. В этом разделе изложены принципы построения полипептидов посредством последовательного выбора остатков аминокислот из библиотеки *HyperChem*.

Чтобы открыть диалоговое меню библиотеки аминокислот:

Выберите меню *Databases (База Данных)* пункт *Amino Acids (Аминокислоты)*.

Это диалоговое меню является устойчивым и остается открытым все время, пока Вы строите полипептид.

Последовательно выбирая остатки, Вы строите вторичную структуру полипептида. Но для этого нужно в диалоговом окне отметить, что должна представлять из себя эта структура: альфа-спираль (*Alpha helix*), бетта-лист (складчатость) (*Beta sheet*) или другие варианты. Автоматически устанавливаются как *phi* так и угол *psi*. Угол омега (*Omega*) можно изменить но обычно это 180 ° для транс-пептидной связи. Начинайте построение с N-конца полипептидной цепи.

Чтобы построить цепь:

L-щелчком последовательно выбирайте аминокислоты начиная с N-концевого остатка. *HyperChem* строит цепь, располагая аминокислоты под соответствующими углами относительно друг друга

Создание цвиттер-иона

В построенной Вами полипептидной цепи N-конец содержит  $\text{NH}_2$ , а C-конец  $-\text{CO}$  группу.

Создание цвиттериона модифицирует N- и C- концевые остатки аминокислот.

Чтобы создать цвиттерион в меню База данных выберите пункт *Цвиттерион*

(*Zwitterion*). *HyperChem* добавит атом кислорода на C-конец полипептида (получится  $\text{COO}^-$ ) и два протона к N-концу (до  $\text{NH}_3^+$ ).

Мутагенез

Сайт-специфический мутагенез играет важную роль в белковой инженерии. Замена конкретной аминокислоты на критическом месте может изменить структуру и свойства белка, а следовательно, функцию.

Чтобы заменить остаток:

Сначала выберите аминокислоту, которую нужно заменить. Для этого в меню *Дисплей* в пункте *Этикетки (Labels)* отметьте *Name+Seq* как опции для маркирования остатков и нажмите ОК.

Можно также в меню *Выбор (Select)* отметить *Остатки (Residues)*.

После чего измените форму курсора на *Select* и L-щелчком кнопки мыши выберите нужную аминокислоту.

В меню *База данных* становится активным пункт *Мутировать (Mutate)*, который ранее был неактивен

В диалоговом меню *Mutate* выберите из списка аминокислоту, на которую будет заменен выделенный остаток и нажмите ОК. Происходит замена

Сохраните полученную структуру.

Упражнения

1. Постройте следующую полипептидную цепь в бетте-конформации:
2. Создайте нуклеиновую кислоту, использующую Nucleic Acids в меню Баз Данных.

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания выполнения лабораторных работ

Описание методики оценивания выполнения лабораторных работ: оценка за выполнение лабораторных работ ставится на основании знания теоретического материала по теме работы, умений и навыков применения знаний на практике, работы с оборудованием, анализировать результаты работы.

**Критерии оценки (в баллах):**

- **5** баллов выставляется студенту, если демонстрируются знания темы, цели и задач лабораторной работы, хода работы, демонстрируется полное знание теоретического материала по теме лабораторной работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются умения и навыки работы с компьютером и графическими редакторами, применения знания на практике, анализа результатов работы и формулирование выводов, владение навыками прикладной деятельности;
- **4** балла выставляется студенту, если демонстрируются знания темы, цели и задач лабораторной работы, хода работы, демонстрируется неполное знание фактического материала по теме лабораторной работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются некоторые недостатки умения работать с компьютером и графическими редакторами, применять знания на практике, недостатки владения навыками прикладной деятельности и способности анализировать результаты работы, формулировать выводы, проследить причинно-следственные связи;
- **3** балла выставляется студенту, если демонстрируются неполные знания цели и задач лабораторной работы, хода работы, демонстрируется неполное, несистемное знание теоретического материала по теме лабораторной работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются заметные недостатки в умении работать с компьютером и графическими редакторами, применять знания на практике, недостаточно владеет навыками прикладной деятельности, способностью анализировать результаты работы и формулировать выводы, проследить причинно-следственные связи;
- **0-2** балла выставляется студенту, если демонстрируются полное или почти полное отсутствие знания цели и задач лабораторной работы, хода работы, демонстрируется полное или почти полное отсутствие знания теоретического материала по теме лабораторной работы (в процессе обсуждения, при ответе на контрольные вопросы); демонстрируются значительные недостатки умения работать с компьютером и графическими редакторами, применять знания на практике, владения навыками прикладной деятельности, способности анализировать результаты работы и формулировать выводы, проследить причинно-следственные связи.

**Зачет**

Зачет является оценочным средством для всех этапов освоения компетенций.

Примерные вопросы к зачету, 2 курс / 3 семестр

1. Состояние развития современной компьютерной техники и телекоммуникаций.
2. Общие сведения о компьютерах, классификация и применение.
3. Архитектура современного персонального компьютера, устройство и основные компоненты.
4. Основные правила работы с персональным компьютером, требования безопасности и соблюдение основ охраны здоровья.
5. Информационные системы, структура и классификация информационных систем.
6. Информационные технологии, их структура и классификация.

7. Безопасность информационных систем и технологий.
8. Информационные технологии в науке и образовании.
9. Технологии искусственного интеллекта.
10. Сети и сетевые информационные технологии.
11. Аппаратное обеспечение компьютерных технологий.
12. Мультимедийное обеспечение информационных технологий.
13. Глобальная информационная сеть Интернет.
14. Использование компьютера в современной химической лаборатории.
15. Программное обеспечение компьютерных технологий.
16. Системное программное обеспечение современного компьютера.
17. Прикладное программное обеспечение современного компьютера.
18. Текстовые редакторы и процессоры. Классификация и возможности.
19. Графические редакторы, общая информация.
20. Современные веб-браузеры Internet Explorer, Google Chrome и т.д.
21. Современные операционные системы. MS Windows, основные особенности.
22. Программные средства для квантово-химических расчетов.
23. Роль визуализации в научной работе. Комплект программ, выполняющих эту роль.
24. Создание и представление химических формул в 2D и 3D.
25. Программа HyperChem, общая информация, возможности и использование.
26. Программа ChemWind, общая информация, возможности и использование.
27. Пакет программ ACDLabs, общая информация, возможности и использование.
28. Использование пакета ACDLabs при обработке ЯМР-спектров.
29. Пакет MS Office, общая информация, возможности.
30. Программа MS Word, общие сведения, особенности редактирования текстовой информации.
31. Программа MS Excel, общие сведения, возможности выполнения научных расчетов, редактирование табличной информации.
32. Программа MS PowerPoint, общие сведения, создание и демонстрация презентаций.
33. Представление результатов в виде статей, презентаций, web-публикаций. Средства для создания презентаций и web-публикаций. Использование форматов PDF для представления научных статей.
34. Поиск химической информации в Интернете. Научные публикации и базы данных.

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания зачета

Зачет выставляется по рейтингу, в зависимости от эффективности работы в процессе изучения дисциплины, что определяется количеством набранных баллов за все виды заданий текущего и рубежного контроля

**зачтено** – от 60 до 110 баллов

**не зачтено** – от 0 до 59 баллов.

### Экзаменационные билеты

Экзамен (зачет) является оценочным средством для всех этапов освоения компетенций. Структура экзаменационного билета: в билете указывается кафедра в рамках нагрузки которой реализуется данная дисциплина, форма обучения, направление и профиль подготовки, дата утверждения; билет может включать в себя теоретический(ие) вопрос(ы) и практическое задание (кейс-задание).

Примерные вопросы к экзамену, 2 курс / 4 семестр

1. Состояние развития современной компьютерной техники и телекоммуникаций.
2. Общие сведения о компьютерах, классификация и применение.
3. Архитектура современного персонального компьютера, устройство и основные компоненты.

4. Основные правила работы с персональным компьютером, требования безопасности и соблюдение основ охраны здоровья.
5. Информационные системы, структура и классификация информационных систем.
6. Информационные технологии, их структура и классификация.
7. Безопасность информационных систем и технологий.
8. Информационные технологии в науке и образовании.
9. Технологии искусственного интеллекта.
10. Сети и сетевые информационные технологии.
11. Аппаратное обеспечение компьютерных технологий.
12. Мультимедийное обеспечение информационных технологий.
13. Глобальная информационная сеть Интернет.
14. Использование компьютера в современной химической лаборатории.
15. Программное обеспечение компьютерных технологий.
16. Системное программное обеспечение современного компьютера.
17. Прикладное программное обеспечение современного компьютера.
18. Современные операционные системы. MS Windows, основные особенности.
19. Современные веб-браузеры Internet Explorer, Google Chrome и т.д.
20. Роль визуализации в научной работе. Комплект программ, выполняющих эту роль.
21. Создание и представление химических формул в 2D и 3D.
22. Компьютерное моделирование в химии.
23. Методы и средства обработки экспериментальных данных в химии.
24. Программные средства для квантово-химических расчетов.
25. Программное обеспечение расчетов по методу MO. GAMESS. Gaussian. Dalton. NWChem. HyperChem. Природа.
26. Программы-интерпретаторы квантово-химических расчетов. ChemCraft. ViewMol3D. Molekel. Molden. GaussView.
27. Программа HyperChem, общая информация, возможности и использование.
28. Программа ChemWind, общая информация, возможности и использование.
29. Пакет программ ACDLabs, общая информация, возможности и использование.
30. Использование пакета ACDLabs для изучения свойств веществ.
31. Использование пакета ACDLabs при обработке ЯМР-спектров.
32. Использование сети Интернет для поиска профессиональной информации.
33. Программные продукты и базы данных по химии.
34. Компьютерные технологии изучения свойств веществ и химических процессов.
35. Расчет биологической активности органических молекул в программе PASS.
36. Программа MS Excel, общие сведения, возможности выполнения научных расчетов, редактирование табличной информации.
37. Представление результатов в виде статей, презентаций, web-публикаций. Средства для создания презентаций и web-публикаций. Использование форматов PDF для представления научных статей.
38. Поиск химической информации в Интернете. Научные публикации и базы данных.

Образец экзаменационного билета

МИНОБРНАУКИ РФ ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ» БИРСКИЙ ФИЛИАЛ УУНИТ Кафедра биологии, экологии и химии	
Дисциплина: Компьютерные технологии в химии	Курсовые экзамены 20__-20__ г. Направление 04.03.01 Химия ВО

очно-заочная форма обучения 2 курс 4 семестр	Профиль: Нефтехимия и химическая технология
<b>Экзаменационный билет № 1</b> 1. Общие сведения о компьютерах, классификация и применение. 2. Создание и представление химических формул в 2D и 3D.	
Дата утверждения: ____.	Заведующий кафедрой _____

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания экзамена.

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины: текущий контроль – максимум 40 баллов; рубежный контроль – максимум 30 баллов, поощрительные баллы – максимум 10.

При оценке ответа на экзамене максимальное внимание должно уделяться тому, насколько полно раскрыто содержание материала, четко и правильно даны определения, раскрыто содержание понятий, верно ли использованы научные термины, насколько ответ самостоятельный, использованы ли ранее приобретенные знания, раскрыты ли причинно-следственные связи, насколько высокий уровень умения оперирования научными категориями, анализа информации, владения навыками практической деятельности.

**Критерии оценки (в баллах):**

- **25-30 баллов** выставляется студенту, если студент дал полные, развернутые ответы на все теоретические вопросы билета, продемонстрировал знание функциональных возможностей, терминологии, основных элементов, умение применять теоретические знания при выполнении практических заданий. Студент без затруднений ответил на все дополнительные вопросы. Практическая часть работы выполнена полностью без неточностей и ошибок;
- **17-24 баллов** выставляется студенту, если студент раскрыл в основном теоретические вопросы, однако допущены неточности в определении основных понятий. При ответе на дополнительные вопросы допущены небольшие неточности. При выполнении практической части работы допущены несущественные ошибки;
- **10-16 баллов** выставляется студенту, если при ответе на теоретические вопросы студентом допущено несколько существенных ошибок в толковании основных понятий. Логика и полнота ответа страдают заметными изъянами. Заметны пробелы в знании основных методов. Теоретические вопросы в целом изложены достаточно, но с пропусками материала. Имеются принципиальные ошибки в логике построения ответа на вопрос. Студент не решил задачу или при решении допущены грубые ошибки;
- **1-10 баллов** выставляется студенту, если ответ на теоретические вопросы свидетельствует о непонимании и крайне неполном знании основных понятий и методов. Обнаруживается отсутствие навыков применения теоретических знаний при выполнении практических заданий. Студент не смог ответить ни на один дополнительный вопрос.

Перевод оценки из 100-балльной в четырехбалльную производится следующим образом:

- отлично – от 80 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- хорошо – от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно – от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно – менее 45 баллов.

**1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

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

### Основная литература

1. Информационные технологии в науке и образовании : учеб. пособ. для магистров, обуч. по спец.552800 "Информатика и вычислит. техника", 540600 "Педагогика" / Е. Л. Федотова , А. А. Федотов .— М. : Форум: ИНФРА-М, 2010 .— 334 с.

### Дополнительная литература

1. Информационные технологии в науке и образовании : учеб. пособ. для магистров, обуч. по спец.552800 "Информатика и вычислит. техника", 540600 "Педагогика" / Е. Л. Федотова , А. А. Федотов .— М. : Форум: ИНФРА-М, 2010 .— 334 с.

### 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://elibrary.ru/>.
2. Электронная библиотечная система «Лань» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/>.
3. Университетская библиотека онлайн biblioclub.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/>.
4. Электронная библиотека УУНиТ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://elib.bashedu.ru/>.
5. Российская государственная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.rsl.ru/>.
6. Национальная электронная библиотека [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://xn--90ax2c.xn--p1ai/viewers/>.
7. Национальная платформа открытого образования proed.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://npoed.ru/>.
8. Электронное образование Республики Башкортостан [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://edu.bashkortostan.ru/>.
9. Информационно-правовой портал Гарант.ру [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.garant.ru/>.

### Программное обеспечение

1. Office Professional Plus - Договор №0301100003620000022 от 29.06.2020, Договор № 2159-ПО/2021 от 15.06.2021, Договор №32110448500 от 30.07.2021
2. Windows - Договор №0301100003620000022 от 29.06.2020, Договор № 2159- ПО/2021 от 15.06.2021, Договор №32110448500 от 30.07.2021
3. Браузер Google Chrome - Бесплатная лицензия [https://www.google.com/intl/ru\\_ALL/chrome/privacy/eula\\_text.html](https://www.google.com/intl/ru_ALL/chrome/privacy/eula_text.html)
4. Браузер Яндекс - Бесплатная лицензия [https://yandex.ru/legal/browser\\_agreement/index.html](https://yandex.ru/legal/browser_agreement/index.html)
5. Справочно-правовая система «Гарант» - Договор №52 от 20.03.2019, Договор №35 от 23.03.2020, Договор №69 от 15 марта 2021, Договор 53 от 16.03.2022 Договор №31 от 16 марта 2023г.
6. Программа для обработки ямр спектров SpinWorks - Бесплатная лицензия [https://fen.nsu.ru/nmr/index.php?option=com\\_content&view=article&id=3&Itemid=4](https://fen.nsu.ru/nmr/index.php?option=com_content&view=article&id=3&Itemid=4)

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

Наименование	Вид занятий	Наименование оборудования,
--------------	-------------	----------------------------

специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий		программного обеспечения
Аудитория 11(БФ)	Лекционная, Семинарская, Для консультаций, Для контроля и аттестации	Коммутатор d-link , источник бесперебойного питания арс, компьютеры в сборе, учебная мебель, доска. Программное обеспечение 1. Windows 2. Программа для обработки ямр спектров SpinWorks
Аудитория 24(БФ)	Для хранения оборудования	Компьютеры в сборке, принтер kyosera 2235, принтер kyosera 2135, принтер brother. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus 2. Windows
Аудитория 40(БФ)	Лекционная, Семинарская, Для консультаций, Для контроля и аттестации	Проектор aser, доска, учебная мебель, настенный экран.
Аудитория 42(БФ)	Для самостоятельной работы	Компьютеры в сборе, учебно-методические материалы. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus 2. Windows 3. Браузер Google Chrome 4. Браузер Яндекс
Читальный зал(ФМ)	Для самостоятельной работы	Ксерокс kyosera, принтер canon lbr 810, компьютеры в сборе, учебная мебель на 100 посадочных мест, учебно-методические материалы. Программное обеспечение 1. Office Professional Plus 2. Windows 3. Справочно-правовая система «Гарант»