




МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОП


(подпись)

Патрушева О.В.
(ФИО)



УТВЕРЖДАЮ

Директор Департамента ядерных технологий


(подпись)

Патрушева О.В.
(И.О. Фамилия)

«5» февраля 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Направление подготовки 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»
профиль «Материаловедение и управление свойствами материалов»
Форма подготовки очная

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 22.03.01 **Материаловедение и технологии материалов**, утвержденного приказом Минобрнауки России от 02 июня 2020 г. №701.

И.о. директора Департамента ядерных технологий к.х.н. О.В. Патрушева

Составитель: к.ф.-м.н., Штарев Д.С.

Владивосток
2023

Оборотная сторона титульного листа РПД

Рабочая программа рассмотрена и утверждена на заседании Департамента ядерных технологий, протокол от «11» февраля 2023 г. № 06.

1. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от « ____ » _____ 202 г. № ____

2. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от « ____ » _____ 202 г. № ____

3. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от « ____ » _____ 202 г. № ____

4. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от « ____ » _____ 202 г. № ____

5. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от « ____ » _____ 202 г. № ____

Аннотация дисциплины «Прикладные программы и базы данных в материаловедении»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётных единицы / 108 академических часов. Является дисциплиной обязательной части ОП, формируемой участниками образовательных отношений, изучается на 4 курсе и завершается экзаменом. Учебным планом предусмотрено проведение 18 часов лекционных занятий и лабораторных работ 36 часов, а также выделены часы на самостоятельную работу студента – 54 часов.

Язык реализации: русский

Цель: освоение современных прикладных программ и баз данных в материаловедении.

Задачи:

- познакомится с прикладными программами и базами данных, применяемых в современном материаловедении;
- наработать необходимый практический навык владения прикладными программами и базами данных, применяемых в современном материаловедении в.

Для успешного изучения дисциплины у обучающихся должны быть сформированы следующие предварительные компетенции: УК-1, УК-2, УК-3, ОПК-1, ОПК-2, полученные в результате изучения дисциплин «Основы цифровой грамотности», «Основы проектной деятельности», «Цифровые технологии в химии и материаловедении», «Неорганическая химия», «Органическая химия».

Обучающийся должен быть готов к изучению таких дисциплин, как «Презентация технологий в материаловедении» формирующих компетенции ПК-6.

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы, характеризуют формирование следующих компетенций, индикаторов

достижения компетенций (формируются также в рамках других дисциплин обязательной части учебного плана:

| Тип задач | Код и наименование компетенции (результат освоения) | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине) |
|--------------------------|---|---|---|
| научно-исследовательский | ПК-1 - Способен использовать в исследованиях и расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств материалов, физических и химических процессах, протекающих в материалах при их получении, обработке и модификации | ПК-1-1 Готов проводить исследования структуры и свойств новых материалов, перспективных для использования | Знает методики правила планирования исследования структуры и свойств новых материалов. Умеет выделять отдельные стадии исследования при наличии общего плана. Владеет навыками планирования отдельных стадий исследования п |
| | | ПК-1.4 Применяет методы моделирования для управления свойствами материалов и их модификации | Знает прикладные программы и базы данных для прогнозирования свойства материалов и их модификации. Умеет проводить обработку результатов . Владеет навыками компьютерного моделирования для решения поставленной задачи. |

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Прикладные программы и базы данных в материаловедении» применяются следующие методы / активного / интерактивного обучения: мозговой штурм, работа в малых группах.

I Цели и задачи освоения дисциплины

Цель: освоение современных прикладных программ и баз данных в материаловедении.

Задачи:

–познакомится с прикладными программами и базами данных, применяемых в современном материаловедении;

–наработать необходимый практический навык владения прикладными программами и базами данных, применяемых в современном материаловедении.

Для успешного изучения дисциплины «Прикладные программы и базы данных в материаловедении» у обучающихся должны быть сформированы предварительные универсальные компетенции выпускников бакалавриата естественнонаучных и инженерных направлений подготовки.

Профессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения:

| Тип задач | Код и наименование компетенции (результат освоения) | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине) |
|--------------------------|---|---|---|
| научно-исследовательский | ПК-1 - Способен использовать в исследованиях и расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств материалов, физических и химических процессах, протекающих в материалах при их получении, обработке и модификации | ПК-1-1 Готов проводить исследования структуры и свойств новых материалов, перспективных для использования | Знает методики правила планирования исследования структуры и свойств новых материалов. Умеет выделять отдельные стадии исследования при наличии общего плана. Владеет навыками планирования отдельных стадий исследования п |
| | | ПК-1.4 Применяет методы моделирования для управления свойствами материалов и их модификации | Знает прикладные программы и базы данных для прогнозирования свойства материалов и их модификации. Умеет проводить обработку результатов . Владеет навыками компьютерного моделирования для решения поставленной задачи. |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | | | |
|--|--|--|--|

II Трудоемкость дисциплины и видов учебных занятий по дисциплине

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётные единицы (108 академических часов).

(1 зачетная единица соответствует 36 академическим часам)

Структура дисциплины:

Форма обучения – очная

| № | Наименование раздела дисциплины | Семестр | Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося | | | | | Формы промежуточной аттестации | |
|---|---|---------|---|-----|----|----|----|--------------------------------|----------|
| | | | Лек | Лаб | Пр | ОК | СР | | Контроль |
| 1 | Раздел I. Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами | 3 | 18 | | 36 | | 54 | | Зачет |
| | Итого: | | 18 | | 36 | | 54 | | |

III СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Тема 1. Структурно-химические данные (2 час.)

Форматы структурно-химических данных. Молекулярные форматы (xyz, mol, pdb, Z-матрица). Описание химических связей и зарядовых состояний. Представление химических реакций (msi, skc). Форматы описания твердых тел (cif, csd). Форматы представления поверхности твердых тел и каталитических процессов (cpd)

Тема 2. Визуализация структурно-химических данных (2 час.)

Двумерное (2D) и трехмерное (3D) представление. Представления двумерных структурных формул. Интерактивное конструирование химических структур. Химические 2D-редакторы. Средства трехмерной графики для визуализации химических данных. Способы 3D-представления химических объектов. Программы просмотра. Интеграция программного обеспечения в области визуализации и редактирования химических данных. Химический офис.

Тема 3. Химические базы данных и поиск химической информации (2 час.)

Химические базы данных и поиск химической информации во всемирной сети. Библиографические базы данных (Chemical Abstracts, Belstein). Универсальные базы физико-химических и структурных данных (Gmelin, Cambridge Soft, NIST).

Тема 4. Специализированные базы данных (2 час.)

Специализированные базы данных по свойствам химических соединений (термодинамические, спектральные и т.д.).

Тема 5. Общие принципы моделирования молекул и твердых тел (4 час.)

Общие принципы моделирования молекул и твердых тел. Квантовая химия, молекулярная динамика, термодинамическое моделирование. Компьютерная химия как виртуальный эксперимент.

Тема 6. Компьютерная идентификация структуры (4 час.)

2 часа. Современные информационные технологии в кристаллографии и дифракционных методах анализа. Компьютерная идентификация структуры и кристаллографические базы данных. Симуляция дифракционных данных и восстановление структуры. Определение эллипсоидов теплового смещения. Роль компьютерных технологий в интерпретации данных дифракционных методов исследования поверхности твердых тел (ДМЭ, EXAFS)

Тема 7. Применение информационных технологий (2 час.)

Применение информационных технологий в спектральных методах анализа. Факторный анализ спектральных данных. Системы автоматической идентификации химических соединений. Интеграция современных методов анализа с использованием информационных технологий. Фурье-спектроскопия. Туннельно-зондовые методы анализа с точки зрения информационного обеспечения. Роль информационных технологий при спектральном исследовании поверхности твердых тел.

IV СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Практические занятия (36 час.)

Тема 1. Практическое занятие (4 час.). Поиск и выборка химической информации.

Тема 2. Практическое занятие (8 час.). Основные принципы построения запроса к химическим базам данных. Оптимизация запроса.

Тема 3. Практическое занятие (8 час.). Проблема идентификации

химических соединений в случае твердых тел.

Тема 4. Практическое занятие (10 час.) Интеграция СУБД и средств просмотра и редактирования.

Тема 5. Практическое занятие (10 час.). Основные принципы построения заданий для квантово-химических расчетов и анализа их результатов (на примере GAMESS и Gaussian). Неэмпирические и полуэмпирические расчеты

V УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Самостоятельная работа определяется как индивидуальная или коллективная учебная деятельность, осуществляемая без непосредственного руководства педагога, но по его заданиям и под его контролем. Самостоятельная работа – это познавательная учебная деятельность, когда последовательность мышления студента, его умственных и практических операций и действий зависит и определяется самим студентом.

Самостоятельная работа студентов способствует развитию самостоятельности, ответственности и организованности, творческого подхода к решению проблем учебного и профессионального уровня, что в итоге приводит к развитию навыка самостоятельного планирования и реализации деятельности.

Целью самостоятельной работы студентов является овладение необходимыми компетенциями по своему направлению подготовки, опытом творческой и исследовательской деятельности.

Формы самостоятельной работы студентов:

- работа с основной и дополнительной литературой, интернет ресурсами;
- самостоятельное ознакомление с лекционным материалом, представленным на электронных носителях, в библиотеке образовательного учреждения;
- работа с основной и дополнительной литературой, интернет ресурсами;
- самостоятельное ознакомление с лекционным материалом, представленным на электронных носителях, в библиотеке образовательного учреждения;
- подготовка реферативных обзоров источников периодической печати, опорных конспектов, заранее определенных преподавателем;
- поиск информации по теме, с последующим ее представлением в аудитории в форме доклада, презентаций;
- подготовка к выполнению аудиторных контрольных работ;

- выполнение домашних контрольных работ;
- выполнение тестовых заданий, решение задач;
- составление схем;
- подготовка сообщений к выступлению на семинаре, конференции;
- заполнение рабочей тетради;
- подготовка к зачетам и экзаменам;
- другие виды деятельности, организуемые и осуществляемые образовательным учреждением и органами студенческого самоуправления.

VI КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

| № п/п | Контролируемые разделы / темы дисциплины | Код и наименование индикатора достижения компетенции | Результаты обучения | Оценочные средства | |
|----------|---|---|---|---|-----------------------------|
| | | | | текущий контроль | промежуточная аттестация |
| 1 | Раздел I. Прикладные программы и базы данных в материаловедении | ПК-1-1 Готов проводить исследования структуры и свойств новых материалов, перспективных для использования | Знает методики правила планирования исследования структуры и свойств новых материалов. Умеет выделять отдельные стадии исследования при наличии общего плана. Владеет навыками планирования отдельных стадий исследования п | Отчет по практическому занятию (ПР-6) Собеседование (УО-1) | Зачет |
| | | ПК-1.4 Применяет методы моделирования для управления свойствами материалов и их модификации | Знает прикладные программы и базы данных для прогнозирования свойства материалов и их модификации. Умеет проводить обработку результатов . Владеет навыками компьютерного моделирования для решения поставленной задачи. | Отчет по практическому занятию (ПР-6) Собеседование (УО-1) | Зачет |

VII СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(электронные и печатные издания)

1. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. Часть 2. Квантовая химия : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. — Москва : Издательство Юрайт, 2023. — 402 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-00128-0. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/513798>
2. Звонарев, С. В. Функциональные и конструкционные наноматериалы : учебно-методическое пособие / С. В. Звонарев ; под редакцией Б. В. Шульгина. — Екатеринбург : Издательство Уральского университета, 2018. — 132 с. — ISBN 978-5-7996-2474-3. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/106802.html>

Дополнительная литература

(печатные и электронные издания)

1. Елисеев, А.А. Функциональные наноматериалы / А.А. Елисеев, А.В. Лукашин; под ред. Ю.Д.Третьякова.—М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010.—456 с.
2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов по химическим спец. / В.И. Барановский.—М.: Academia, 2008.—383 с.
3. Гусев, А.И. Наноматериалы. Наноструктуры. Нанотехнологии / А.И.Гусев.—М.: Физматлит,2009.—415 с.
4. Мельников, В.П. Информационные технологии: учебник для вузов/ В.П.Мельников.—М.: Academia, 2008.—425 с.
5. Рамбиди, Н.Г. Физические и химические основы нанотехнологий/ Н.Г.Рамбиди, А.В. Березкин.—М.: Физматлит, 2009.—454 с.
6. Романенко, В.Н. Работа в Интернете: от бытового до профессионального поиска: практическое пособие с примерами и упражнениями / В.Н.Романенко, Г.В.Никитина, В.С.Неверов.—СПб.: Профессия, 2008.—416 с.
7. Суздаев, И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов/ И.П.Суздаев.—Изд 2-е испр.—М.: ЛИБРОКОМ, 2009.—592 с

8. Романенко, В.Н. Работа в Интернете: от бытового до профессионального поиска: практическое пособие с примерами и упражнениями / В.Н.Романенко, Г.В.Никитина, В.С.Неверов.-СПб.: Профессия, 2008.-416 с.

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. Reaxys.com
2. https://srdata.nist.gov/xps/main_search_menu.aspx
3. <http://www.crystallography.net/cod/>
4. <https://www.ccdc.cam.ac.uk/>

Перечень информационных технологий и программного обеспечения

1. Пакет программного обеспечения Microsoft Office (Word, Outlook, Power Point, Excel, Photoshop)

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. База данных Scopus <http://www.scopus.com/home.url>
2. База данных Web of Science <http://apps.webofknowledge.com/>
3. База данных полнотекстовых академических журналов Китая <http://oversea.cnki.net/>
4. Электронные базы данных EBSCO <http://search.ebscohost.com/>

VIII МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Успешное освоение дисциплины предполагает активную работу студентов на всех занятиях аудиторной формы: лекциях и практиках, выполнении аттестационных мероприятий. В процессе изучения дисциплины студенту необходимо ориентироваться на проработку лекционного материала,

подготовку к практическим занятиям, выполнение контрольных и лабораторных работ.

Освоение дисциплины «Прикладные программы и базы данных в материаловедении» предполагает возможность использования рейтинговой системы оценки знаний студентов и предусматривает со стороны преподавателя текущий контроль за посещением студентами лекций, подготовкой и выполнением всех практических заданий, выполнением всех видов самостоятельной работы.

Промежуточной аттестацией по дисциплине «Прикладные программы и базы данных в материаловедении» является экзамен.

Студент считается аттестованным по дисциплине при условии выполнения всех видов текущего контроля и самостоятельной работы, предусмотренных учебной программой.

Шкала оценивания сформированности образовательных результатов по дисциплине представлена в фонде оценочных средств (ФОС).

IX МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебные занятия по дисциплине могут проводиться в следующих помещениях, оснащенных соответствующим оборудованием и программным обеспечением, расположенных по адресу 690022, г. Владивосток, о.Русский, п. Аякс, 10:

Перечень материально-технического и программного обеспечения дисциплины приведен в таблице.

| Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы ¹ | Оснащенность специальных помещений и помещений для проведения учебных занятий, для самостоятельной работы | Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа |
|--|---|--|
| Учебные аудитории для проведения учебных занятий: | | |
| L450 | 11 компьютеров (системный блок модель - 30AGCT01WW P3+монитором AOC 28" LI2868POU). Учебная мебель, рабочее место преподавателя, доска, демонстрационное мультимедийное оборудование (ноутбук, мультимедиа-проектор, экран), доступ к Internet, доступ к системе ДВФУ по электронной поддержке обучения Black Board Learning. | IBM SPSS Statistics Premium Campus Edition. Поставщик ЗАО Прогностические решения. Договор ЭА-442-15 от 18.01.2016 г., лот 5. Срок действия договора с 30.06.2016 г. Лицензия - бессрочно. SolidWorks Campus 500. Поставщик Солид Воркс Р. Договор 15-04-101 от |

¹ В соответствии с п.4.3. ФГОС

| | | |
|--|--|--|
| | | <p>23.12.2015 г. Срок действия договора с 15.03.2016 г. Лицензия - бессрочно. АСКОН Компас 3D v17. Поставщик Навиком. Договор 15-03-53 от 20.12.2015 г. Срок действия договора с 31.12.2015 г. Лицензия - бессрочно. MathCad Education University Edition. Поставщик Софт Лайн Трейд. Договор 15-03-49 от 02.12.2015 г. Срок действия договора с 30.11.2015 г. Лицензия - бессрочно. Windows Edu Per Device 10 Education. Поставщик Microsoft. Договор № ЭА-261-18 от 30.06.2018 г. Подписка. Срок действия договора с 30.06.2018 г. Лицензия - 30.06.2020 г. Office Professional Plus 2019. Поставщик Microsoft. Договор № ЭА-261-18 от 30.06.2018 г. Подписка. Срок действия договора с 30.06.2018 г. Лицензия - бессрочно. Autocad 2018. Поставщик Autodesk. Договор № 110002048940 от 27.10.2018 г. Сетевая, конкурентная. Срок действия договора с 27.10.2018 г. Лицензия - 27.10.2021 г. Сублицензионное соглашение Blackboard № 2906/1 от 29.06.2012.</p> |
| Помещения для самостоятельной работы: | | |
| А1042 аудитория для самостоятельной работы студентов | <p>Моноблок Lenovo C360G-i34164G500UDK – 115 шт.; Интегрированный сенсорный дисплей Polymedia FlipBox; Копир-принтер-цветной сканер в e-mail с 4 лотками Xerox WorkCentre 5330 (WC5330C; Полноцветный копир-принтер-сканер Xerox WorkCentre 7530 (WC7530CPS Оборудование для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья: Дисплей</p> | <p>Microsoft Windows 7 Pro MAGic 12.0 Pro, Jaws for Windows 15.0 Pro, Open book 9.0, Duxbury BrailleTranslator, Dolphin Guide (контракт № А238-14/2); Неисключительные права на использование ПО Microsoft рабочих станций пользователей (контракт ЭА-261-18 от 02.08.2018): -</p> |

| | | |
|--|--|---|
| | <p>Брайля Focus-40 Blue – 3 шт.; Дисплей Брайля Focus-80 Blue; Рабочая станция Lenovo ThinkCentre E73z – 3 шт.; Видео увеличитель ONYX Swing-Arm PC edition; Маркер-диктофон Touch Memo цифровой; Устройство портативное для чтения плоскочечатных текстов PEarl; Сканирующая и читающая машина для незрячих и слабовидящих пользователей SARA; Принтер Брайля Emprint SpotDot - 2 шт.; Принтер Брайля Everest - D V4; Видео увеличитель ONYX Swing-Arm PC edition; Видео увеличитель Topaz 24” XL стационарный электронный; Обучающая система для детей тактильно-речевая, либо для людей с ограниченными возможностями здоровья; Увеличитель ручной видео RUBY портативный – 2 шт.; Экран Samsung S23C200B; Маркер-диктофон Touch Memo цифровой.</p> | <p>лицензия на клиентскую операционную систему; - лицензия на пакет офисных продуктов для работы с документами включая формат.docx , .xlsx , .vsd , .ppt.; - лицензия на право подключения пользователя к серверным операционным системам , используемым в ДВФУ : Microsoft Windows Server 2008/2012; - лицензия на право подключения к серверу Microsoft Exchange Server Enterprise; - лицензия на право подключения к внутренней информационной системе документооборота и порталу с возможностью поиска информации во множестве удаленных и локальных хранилищах, ресурсах, библиотеках информации, включая порталные хранилища, используемой в ДВФУ: Microsoft SharePoint; - лицензия на право подключения к системе централизованного управления рабочими станциями, используемой в ДВФУ: Microsoft System Center.</p> |
|--|--|---|