



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

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОП

(подпись)

Штарев Д. С.
(Ф.И.О.)



УТВЕРЖДАЮ

Директор департамента ядерных технологий

(подпись)

Тананаев И.Г.
(Ф.И.О.)

19 декабря 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Прикладные программы и базы данных в материаловедении
Направление 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

Программа магистратуры «Цифровое материаловедение (совместно с МИСИС)»
Форма подготовки очная

курс 2 семестр 3
лекции 14 час.
практические занятия 20 час.
всего часов аудиторной нагрузки 34 час.
самостоятельная работа 74 час.
зачет 3 семестр
экзамен не предусмотрен

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов утвержденного приказом Министерства образования и науки РФ от 24 апреля 2018 г. № 306.

Рабочая программа обсуждена на заседании Департамента ядерных технологий
протокол № 3 от « 19 » декабря 2021 г.

Директор департамента Тананаев И.Г.

Составитель: к.ф.-м.н., Штарев Д.С.

Владивосток
2022

Оборотная сторона титульного листа РПД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании *департамента*:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № _____

Заведующий *департаментом* _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании *департамента*:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № _____

Заведующий *департаментом* _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

III. Рабочая программа пересмотрена на заседании *департамента*:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № _____

Заведующий *департаментом* _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

IV. Рабочая программа пересмотрена на заседании *департамента*:

Протокол от « ____ » _____ 20__ г. № _____

Заведующий *департаментом* _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

I Цели и задачи освоения дисциплины

Цель: освоение современных прикладных программ и баз данных в материаловедении

Задачи:

– познакомиться 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 «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 профессиональной компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции
технологический	ПК-4 Способен моделировать процессы получения материалов, их обработок и прогнозировать результаты их осуществления при различных режимах, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	ПК-4.1 – Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования;
		ПК-4.2 Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования
		ПК-4.3 Применяет методы моделирования для разработки новых материалов различного состава и назначения с заданным уровнем свойств и структурных характеристик и их модификации, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
ПК-4.1 – Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования;	Знает стандартные пакеты компьютерных программ
	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ
	Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач
ПК-4.2 – Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Знает стандартные пакеты компьютерных программ
	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ
	Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач
ПК-4.3 Применяет методы моделирования для разработки новых материалов различного состава и назначения с заданным уровнем свойств и структурных характеристик и их модификации, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Знает стандартные пакеты компьютерных программ
	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ
	Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач

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)

Видами учебных занятий и работы обучающегося по дисциплине могут являться:

Обозначение	Виды учебных занятий и работы обучающегося
Лек	Лекции
Пр	Практика
СР	Самостоятельная работа обучающегося в период теоретического обучения
Контроль	Самостоятельная работа обучающегося и контактная работа обучающегося с преподавателем в период промежуточной аттестации

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	14		20		74		Зачет
	Итого:		14		20		74		

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 (2 час.)

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

Тема 6. Компьютерная идентификация структуры (2 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

Практическая часть курса и самостоятельная работа обучающихся являются дополняющими друг друга видами деятельности по освоению дисциплины «Прикладные программы и базы данных в материаловедении». Самостоятельная работа включает в себя предварительную индивидуальную и/или групповую подготовку теоретических основ практических заданий. Практическая часть заключается в решении и последующем анализе задач, поставленных перед обучающимися, на практических занятиях при сопровождении преподавателя.

Практические занятия (20 час.) и самостоятельная работа (74 час.)

Тема 1. Практическое занятие (4 час.), самостоятельная работа (14 час.). Поиск и выборка химической информации.

Тема 2. Практическое занятие (4 час.), самостоятельная работа (14 час.). Основные принципы построения запроса к химическим базам данных. Оптимизация запроса.

Тема 3. Практическое занятие (4 час.), самостоятельная работа (14 час.). Проблема идентификации химических соединений в случае твердых тел.

Тема 4. Практическое занятие (4 час.), самостоятельная работа (14 час.). Интеграция СУБД и средств просмотра и редактирования.

Тема 5. Практическое занятие (4 час.), самостоятельная работа (18 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

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Компьютерный дизайн материалов с заданными свойствами» включает в себя:

- план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе примерные нормы времени на выполнение по каждому заданию;
- требования к представлению и оформлению результатов самостоятельной работы;
- критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине

№ п/п	Вид самостоятельной работы	Дата/сроки выполнения	Примерные нормы времени на выполнение	Форма контроля
1	Подготовка к практическим занятиям, изучение литературы	В течение семестра	10 часов	Работа на практических занятиях.
2	Подготовка к практическим занятиям	1-3 неделя семестра	10 часов	Работа на практических занятиях.
3	Подготовка к практическим занятиям	4-6 неделя семестра	10 часов	Работа на практических занятиях.
4	Подготовка к практическим занятиям	7-9 неделя семестра	10 часов	Работа на практических занятиях.
5	Подготовка к практическим занятиям	10-12 неделя семестра	10 часов	Работа на практических занятиях.
6	Подготовка к практическим занятиям	13-15 неделя семестра	10 часов	Работа на практических занятиях.
7	Подготовка к зачету	16-18 неделя семестра	14 часов	зачет

Рекомендации по самостоятельной работе студентов

Планирование и организация времени, отведенного на выполнение заданий самостоятельной работы.

Изучив график выполнения самостоятельных работ, следует правильно её организовать. Рекомендуется изучить структуру каждого задания, обратить внимание на график выполнения работ, отчетность по каждому заданию предоставляется в последнюю неделю согласно графику. Обратите внимание, что итоги самостоятельной работы влияют на окончательную оценку по итогам освоения учебной дисциплины.

Работа с литературой.

При выполнении ряда заданий требуется работать с литературой. Рекомендуется использовать различные возможности работы с литературой: фонды научной библиотеки ДВФУ (<http://www.dvfu.ru/library/>) и других ведущих вузов страны, а также доступных для использования научно-библиотечных систем.

В процессе выполнения самостоятельной работы рекомендуется работать со следующими видами изданий:

а) Научные издания, предназначенные для научной работы и содержащие теоретические, экспериментальные сведения об исследованиях. Они могут публиковаться в форме: монографий, научных статей в журналах или в научных сборниках;

б) Учебная литература подразделяется на:

- учебные издания (учебники, учебные пособия, тексты лекций), в которых содержится наиболее полное системное изложение дисциплины или какого-то ее раздела;
- справочники, словари и энциклопедии – издания, содержащие краткие сведения научного или прикладного характера, не предназначенные для сплошного чтения. Их цель – возможность быстрого получения самых общих представлений о предмете.

Существуют два метода работы над источниками:

- сплошное чтение обязательно при изучении учебника, глав монографии или статьи, то есть того, что имеет учебное значение. Как правило, здесь требуется повторное чтение, для того чтобы понять написанное. Старайтесь при сплошном чтении не пропускать комментарии, сноски, справочные материалы, так как они предназначены для пояснений и помощи. Анализируйте рисунки (карты, диаграммы, графики), старайтесь понять, какие

тенденции и закономерности они отражают;

– метод выборочного чтения дополняет сплошное чтение; он применяется для поисков дополнительных, уточняющих необходимых сведений в словарях, энциклопедиях, иных справочных изданиях. Этот метод крайне важен для повторения изученного и его закрепления, особенно при подготовке к зачету.

Для того чтобы каждый метод принес наибольший эффект, необходимо фиксировать все важные моменты, связанные с интересующей Вас темой.

Тезисы – это основные положения научного труда, статьи или другого произведения, а возможно, и устного выступления; они несут в себе больший объем информации, нежели план. Простые тезисы лаконичны по форме; сложные – помимо главной авторской мысли содержат краткое ее обоснование и доказательства, придающие тезисам более весомый и убедительный характер. Тезисы прочитанного позволяют глубже раскрыть его содержание; обучаясь излагать суть прочитанного в тезисной форме, вы сумеете выделять из множества мыслей авторов самые главные и ценные и делать обобщения.

Конспект – это способ самостоятельно изложить содержание книги или статьи в логической последовательности. Конспектируя какой-либо источник, надо стремиться к тому, чтобы немногими словами сказать о многом. В тексте конспекта желательно поместить не только выводы или положения, но и их аргументированные доказательства (факты, цифры, цитаты).

Писать конспект можно и по мере изучения произведения, например, если прорабатывается монография или несколько журнальных статей.

Составляя тезисы или конспект, всегда делайте ссылки на страницы, с которых вы взяли конспектируемое положение или факт, – это поможет вам сократить время на поиск нужного места в книге, если возникает потребность глубже разобраться с излагаемым вопросом или что-то уточнить при написании письменных работ.

Методические рекомендации по выполнению заданий для самостоятельной работы и критерии оценки.

Отчёты по практическим работам представляются в электронной форме, подготовленные как текстовые документы в редакторе MS Word.

Отчёт по работе должен быть обобщающим документом, включать всю информацию по выполнению заданий, в том числе, построенные диа-граммы, таблицы, приложения, список литературы и (или) расчеты, с со-провождением необходимыми пояснениями и иллюстрациями в виде схем, экранных форм («скриншотов») и т. д.

Структурно отчёт по практической работе, как текстовый документ, комплектуется по следующей схеме:

– Титульный лист – обязательная компонента отчета, первая страница отчёта, по принятой для практических работ форме (титульный лист отчёта должен размещаться в общем файле, где представлен текст отчёта);

– Исходные данные к выполнению заданий – обязательная компонента отчета, с новой страницы, содержат указание варианта, темы и т.д.);

– Основная часть – материалы выполнения заданий, разбивается по рубрикам, соответствующих заданиям работы, с иерархической структурой: разделы – подразделы – пункты – подпункты и т. д. (рекомендуется в основной части отчета заголовки рубрик (подрубик) давать исходя из формулировок заданий, в форме отглагольных существительных);

– Выводы – обязательная компонента отчета, содержит обобщающие выводы по работе (какие задачи решены, оценка результатов, что освоено при выполнении работы);

– Список литературы – обязательная компонента отчета, с новой страницы, содержит список источников, использованных при выполнении работы, включая электронные источники (список нумерованный, в соответствии с правилами описания

библиографии);

– Приложения – необязательная компонента отчета, с новой страницы, содержит дополнительные материалы к основной части отчета.

Набор текста осуществляется на компьютере, в соответствии со следующими требованиями:

– печать – на одной стороне листа белой бумаги формата А4 (размер 210 на 297 мм.);

– интервал межстрочный – полуторный;

– шрифт – Times New Roman;

– размер шрифта - 14 пт., в том числе в заголовках (в таблицах допускается 10-12 пт.);

– выравнивание текста – «по ширине»;

– поля страницы: левое – 25-30 мм., правое – 10 мм., верхнее и нижнее – 20 мм.;

– нумерация страниц – в правом нижнем углу страницы (для страниц с книжной ориентацией), сквозная, от титульного листа до последней страницы, арабскими цифрами (первой страницей считается титульный лист, на котором номер не ставится, на следующей странице проставляется цифра «2» и т. д.).

– режим автоматического переноса слов, за исключением титульного листа и заголовков всех уровней (перенос слов для отдельного абзаца блокируется средствами MSWord с помощью команды «Формат» – абзац при выборе опции «запретить автоматический перенос слов»).

Если рисунок или таблица размещены на листе формата больше А4, их следует учитывать как одну страницу. Номер страницы в этих случаях допускается не проставлять.

Список литературы и все приложения включаются в общую сквозную нумерацию страниц работы.

Критерии оценки.

Оценка	Требования
«зачтено»	Обучающийся владеет навыками самостоятельной работы по теме исследования, методами анализа теоретических и/или практических аспектов изучаемой области, умеет реферировать литературные источники. Умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы. Работа соответствует требованиям и выполнена в установленные сроки.
«не зачтено»	Не раскрыта структура и теоретическая составляющая темы. Обучающийся не умеет обобщать фактический материал, делать самостоятельные выводы, не владеет навыком реферировать литературные источники.

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-4.1 – Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования;	Знает стандартные пакеты компьютерных программ	Отчет по практическому занятию (ПР-6) Собеседование (УО-1)	Зачет
			Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ		
			Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач		
		ПК-4.2 – Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Знает стандартные пакеты компьютерных программ	Отчет по практическому занятию (ПР-6) Собеседование (УО-1)	Зачет
			Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ		
			Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач		
		ПК-4.3 Применяет методы моделирования для разработки новых материалов различного состава и назначения с	Знает стандартные пакеты компьютерных программ	Отчет по практическому занятию (ПР-6) Собеседование (УО-1)	Зачет
			Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ		

		заданным уровнем свойств и структурных характеристик и их модификации, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач		
--	--	--	--	--	--

Типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности, а также критерии и показатели, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие результаты обучения, представлены в Приложении

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

Планирование и организация времени, отведенного на изучение дисциплины

Приступить к освоению дисциплины следует незамедлительно в самом начале учебного семестра. Рекомендуется изучить структуру и основные положения Рабочей программы дисциплины. Обратит внимание, что кроме аудиторной работы (лекции, лабораторные занятия) планируется самостоятельная работа, итоги которой влияют на окончательную оценку по итогам освоения учебной дисциплины. Все задания (аудиторные и самостоятельные) необходимо выполнять и предоставлять на оценку в соответствии с графиком.

В процессе изучения материалов учебного курса предлагаются следующие формы работ: практические занятия, задания для самостоятельной работы.

Практические занятия акцентированы на наиболее принципиальных и проблемных вопросах курса и призваны стимулировать выработку практических умений.

Особо значимой для профессиональной подготовки студентов является *самостоятельная работа* по курсу. В ходе этой работы студенты отбирают необходимый материал по изучаемому вопросу и анализируют его. Студентам необходимо ознакомиться с основными источниками, без которых невозможно полноценное понимание проблематики курса.

Освоение курса способствует развитию навыков обоснованных и самостоятельных оценок фактов и концепций. Поэтому во всех формах контроля знаний, особенно при сдаче зачета, внимание обращается на понимание проблематики курса, на умение практически

применять знания и делать выводы.

Работа с литературой. Рекомендуется использовать различные возможности работы с литературой: фонды научной библиотеки ДВФУ и электронные библиотеки (<http://www.dvfu.ru/library/>), а также доступные для использования другие научно-библиотечные системы.

Подготовка к экзамену. К сдаче экзамена допускаются обучающиеся, выполнившие все задания, предусмотренные учебной программой дисциплины, посетившие не менее 85% аудиторных занятий.

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 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 Universety Edition.

¹ В соответствии с п.4.3. ФГОС

		<p>Поставщик Софт Лайн Трейд. Договор 15-03-49 от 02.12.2015 г. Срок действия договора с 30.11.2015 г. Лицензия - бессрочно.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>Сублицензионное соглашение Blackboard № 2906/1 от 29.06.2012.</p>
<p>Помещения для самостоятельной работы:</p>		
<p>А1042 аудитория для самостоятельной работы студентов</p>	<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 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;</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 № A238-14/2); Неисключительные права на использование ПО Microsoft рабочих станций пользователей (контракт ЭА-261-18 от 02.08.2018): - лицензия на клиентскую операционную систему; - лицензия на пакет офисных продуктов для работы с документами включая формат.docx , .xlsx , .vsd , .ppt. ; - лицензия па право подключения пользователя к серверным операционным системам , используемым в ДВФУ : Microsoft Windows</p>

	<p>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 Мемо цифровой.</p>	<p>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>
--	---	--

Для проведения учебных занятий по дисциплине, а также для организации самостоятельной работы студентам доступно следующее лабораторное оборудование и специализированные кабинеты, соответствующие действующим санитарным и противопожарным нормам, а также требованиям техники безопасности при проведении учебных и научно-производственных работ.

В целях обеспечения специальных условий обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в ДВФУ все здания оборудованы пандусами, лифтами, подъемниками, специализированными местами, оснащенными туалетными комнатами, табличками информационно-навигационной поддержки.

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

ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
по дисциплине «Прикладные программы и базы данных в
материаловедении»
Направление подготовки 22.04.01 Материаловедение и технологии
материалов
Программа магистратуры «Цифровое материаловедение
(совместно с МИСИС)»
Форма подготовки очная

Владивосток
2022

Перечень форм оценивания, применяемых на различных этапах формирования компетенций в ходе освоения дисциплины / модуля

№ 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-4.1 – Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования;	Знает стандартные пакеты компьютерных программ	Отчет по практическому занятию (ПР-6) Собеседование (УО-1)	Зачет
			Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ		
			Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач		
		ПК-4.2 – Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Знает стандартные пакеты компьютерных программ	Отчет по практическому занятию (ПР-6) Собеседование (УО-1)	Зачет
			Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ		
			Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач		
		ПК-4.3 Применяет методы моделирования для	Знает стандартные пакеты компьютерных программ		Зачет

		<p>разработки новых материалов различного состава и назначения с заданным уровнем свойств и структурных характеристик и их модификации, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования</p>	<p>Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ</p> <hr/> <p>Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач</p>	<p>Отчет по практическому занятию (ПР-6) Собеседование (УО-1)</p>	
--	--	---	--	---	--

Оценочные средства для промежуточной аттестации

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения	Шкала оценивания промежуточной аттестации	
		Не зачтено	Зачтено
ПК-4.1 – Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования;	Знает стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Знает стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования
	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования
	Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Владеет навыками применения выбранных методов к решению научных задач
ПК-4.2 – Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств	Знает стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Знает стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования
	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования

автоматизированного проектирования	Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач
ПК-4.3 Применяет методы моделирования для разработки новых материалов различного состава и назначения с заданным уровнем свойств и структурных характеристик и их модификации, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Знает стандартные пакеты компьютерных программ	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Знает стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования
	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Умеет правильно использовать стандартные пакеты компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования
	Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.	Владеет навыками критической оценки полученных результатов для обоснования выбора оптимальной стратегии решения исследовательских и практических задач

Список вопросов к зачету

1. Типы данных и форматы их представления в бинарной и текстовой форме. Разрядность численных данных. Особенности текстовых данных. Кодировки текста. Поддержка и версии форматов данных. Проблемы совместимости и переносимости данных.
2. Форматы текстовых данных. Кодовые таблицы. Разрядность кодировки. 8-битные кодовые таблицы. Стандарт UNICODE. Проблемы информационной избыточности и совместимости кодовых таблиц.
3. Форматы численных данных. Целые числа и числа с плавающей запятой. Бинарное и текстовое представление. Различия бинарных форматов для различных платформ.
4. Форматы структурно-химических данных. Проблемы совместимости и кросс-платформности. Молекулярные форматы (xyz, mol, pdb, Z-матрица). Принципы организации данных и информационная избыточность.
5. Средства трехмерной графики для визуализации химических данных. Операции проектирования. Аппаратная поддержка 3D-визуализации. Отображение графических примитивов: точки, линии, полигоны, трехмерные геометрические объекты и их поверхности. Эффекты освещения. Цветовая заливка и текстурирование.
6. Визуализация молекулярных объектов. Способы и стили 3D-представления атомов и химических связей. Мониторинг структурных параметров. Использование текста в 3D-графике: метки атомов, структурные характеристики. Программное обеспечение для 3D-визуализации (просмотра) молекулярных данных.
7. Проблемы редактирования и построения молекулярных структур в 3D-представлении. Неоднозначность операции обратного проектирования. Использование мониторов при 3D-редактировании. Оптимизация структуры молекул.
8. Визуализация молекулярных структурно-химических данных в виде двумерных структурных формул. Основные принципы. Стили отображения атомов и связей. Интерактивное конструирование и дизайн молекулярных химических структур. Шаблоны (темплеты) молекулярных фрагментов. Проверка (Check) и очистка (Clean Up) структуры. Химические 2D-редакторы.
9. Интеграция программного обеспечения в области визуализации и редактирования химических данных. Программные средства интеграции. Химический офис.
10. Формат описания твердых тел cif. Основные правила и ограничения текстовых записей. Синтаксис стандарта CIF. Основные теги CIF.
11. Особенности визуализации кристаллических структур. Отображение элементарной ячейки. Отображение периодических структур. Специальные стили 3D-визуализации кристаллов. Программы 3D-визуализации кристаллов.
12. Структурное моделирование и анализ кристаллических твердых тел. Модели поверхности кристалла и кристаллографических сечений объемной структуры.

Критерии оценивания

Оценка	Требования
«зачтено»	Студент показал развернутый ответ на вопрос, знание литературы, обнаружил понимание материала, обоснованность суждений, неточности в ответе исправляет самостоятельно.
«не зачтено»	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.

Оценочные средства для текущего контроля

Текущая аттестация студентов по дисциплине проводится в соответствии с локальными нормативными актами ДВФУ и является обязательной.

Текущая аттестация проводится в форме контрольных мероприятий: практических работ по оцениванию фактических результатов обучения студентов и осуществляется ведущим преподавателем.

Объектами оценивания выступают:

- учебная дисциплина (активность на занятиях, своевременность выполнения различных видов заданий, посещаемость всех видов занятий по аттестуемой дисциплине);
- степень усвоения теоретических знаний;
- уровень овладения практическими умениями и навыками по всем видам учебной работы;
- результаты самостоятельной работы.

Составляется календарный план контрольных мероприятий по дисциплине. Оценка посещаемости, активности обучающихся на занятиях, своевременность выполнения различных видов заданий ведётся на основе журнала, который ведёт преподаватель в течение учебного семестра.

Текущая аттестация выполняется по результату оценки собеседования по результатам выполненных практических работ (УО-1) по темам практических занятий, подготовка реферата (ПР-4), отчет по практической работе (ПР-6).

Тематика практических работ

1. Изучение и алгоритмизация моделей физических систем
2. Планирование и анализ статистических экспериментов
3. Обработка и анализ результатов моделирования

Критерии оценивания

Оценка	Требования
«зачтено»	Студент показал развернутый ответ на вопрос, знание литературы, обнаружил понимание материала, обоснованность суждений, неточности в ответе исправляет самостоятельно.
«не зачтено»	Студент обнаруживает незнание вопроса, неуверенно излагает ответ.

Список тем рефератов

1. Методы поиска и выборка химической информации.
2. Основные принципы построения запроса к химическим базам данных.
3. Проблема идентификации химических соединений в случае твердых тел.
4. Интеграция СУБД и средств просмотра и редактирования.
5. Основные принципы построения заданий для квантово-химических расчетов и анализа их результатов (на примере GAMESS)
6. Основные принципы построения заданий для квантово-химических расчетов и анализа их результатов (на примере Gaussian).

Критерии оценки реферата

5 баллов (отлично), выставляется студенту, если студент точно определил содержание темы реферата и составляющие; работа характеризуется смысловой целостностью, связностью и последовательность изложения; приведены литературные данные, статистические сведения; студент владеет навыком самостоятельного поиска необходимой по теме реферата информации, методами поиска информации, приемами анализа и выбора теоретической информации; фактических ошибок, связанных с пониманием и раскрытием темы доклада нет.

4 балла (хорошо) выставляется, если студент достаточно точно определил содержание реферата и составляющие; работа характеризуется смысловой целостностью, связностью и последовательность изложения; допущено незначительные ошибки при объяснении содержания темы; приведены литературные данные; студент владеет навыком самостоятельного поиска необходимой по теме информации; фактических ошибок, связанных с пониманием и раскрытием темы нет.

3 балла (удовлетворительно) выставляется, если студент если студент по теме реферата определил основное его содержание и составляющие; понимает базовые теоретические основы темы доклада ; допущено незначительные ошибки при объяснении содержания темы доклада; не приведены литературные данные; студент показывает не достаточное обладание навыком самостоятельного поиска необходимой по теме доклада информации; имеются незначительные фактические ошибки, связанные с пониманием и раскрытием темы реферата.

1-2 балла (неудовлетворительно) выставляется, если используется для реферата текст без переработки, анализа и комментариев, отсутствуют понимание темы; не раскрыта содержание темы доклада; отсутствует логическая последовательность в структуре реферата.