



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ**

**Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук
(ИОХ РАН)**

«УТВЕРЖДАЮ»
Директор Института
М.П. Егоров
«13» *М.П. Егоров* 2017 г.

академик РАН

Рабочая программа дисциплины

Информатика и вычислительная техника

по направлению подготовки - 04.06.01 Химические науки
(уровень подготовки кадров высшей квалификации)

Направленность (профиль)

02.00.03 Органическая химия

02.00.04 Физическая химия

02.00.10 - Биоорганическая химия

02.00.15 - Кинетика и катализ

Москва

2017 год

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 № 869.

Разработчики:

Кандидат химических наук

_____ Н.В.Круковская

Кандидат химических наук, доцент
кафедры фундаментальных проблем химии
химического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова

_____ И.В.Свитанько

Программа принята на заседании Ученого совета ИОХ РАН

Протокол № от «13» июня 2017 г.

Ученый секретарь:

Кандидат химических наук  И.К. Коршевец

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели дисциплины: Подготовить аспирантов и специалистов – физико-химиков к научно-исследовательской деятельности, связанной с разработкой и применением компьютерных методов в различных областях органической, элементоорганической и физической химии. Ознакомление с современными информационными технологиями, их применением для практики проведения научного исследования и анализа данных. Особое внимание уделяется рассмотрению подготовки результатов к публикации.

Задачи дисциплины:

- обучение аспирантов самостоятельной подготовке результатов своих исследований к публикации;
- расширение систематических знаний по информационным технологиям и их прикладное применение;
- освоение практических навыков эффективной работы с массовым и научным программным обеспечением.

Программа разработана с учетом развития современных информационных технологий и перспективы их использования в системе химического образования и в научной работе в области фундаментальной химии. Реализация этой программы позволит повысить эффективность освоения химических дисциплин в системе высшего профессионального образования, а также повысить качество применения полученных знаний и умений в практике химика-исследователя.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Настоящая дисциплина «Информатика и вычислительная техника» - модуль основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки, относится к дисциплинам вариативной части Блока № 1. Обучающийся по данной дисциплине должен иметь фундаментальные представления по физической химии. Для изучения данной дисциплины необходимо высшее образование с освоением курса физической химии для химических специальностей.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

Общепрофессиональные компетенции:

готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);

готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования в области физической химии (ОПК-3).

Профессиональные компетенции:

способность и готовность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ПК-1).

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы (144 часа).

Дисциплина изучается на 1-м году аспирантуры.

4.1. Структура дисциплины:

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб.	Прак.	Контроль		
1	Информатика и вычислительная техника	144	100	10	90	-	18	26	экзамен

4.2 Содержание дисциплины.

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий.

№	Наименование раздела	Лекции	Лаб.	Контроль знаний
1.	Введение	1	6	1
2.	Операционные системы	2	10	1
3.	Компьютерные сети	3	6	1
4.	Программное обеспечение	2	48	9
5.	Работа с базами данных	1	10	2
6.	Молекулярное моделирование и расчеты	1	10	1

7.	Контрольные работы, экзамен	—	—	3
Всего		10	90	18

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	Аппаратное обеспечение	История развития компьютеров. Назначение компьютеров. Компоненты компьютера (устройства ввода, вывода, системный блок). Основные компоненты системного блока (материнская плата, процессор, оперативная память, видеокарта, жесткий диск, охлаждение устройств; устройства ввода-вывода: модем, сетевой адаптер) и их разновидности. Носители информации. Понятия команды, программы, выполнение программы процессором. Представление данных в компьютере. Периферийное оборудование (принтеры, сканеры) и их разновидности. Способы подключения внешних устройств (LPT, COM, USB, FireWire, BlueTooth). Модернизация.	Лекции, лабораторные работы
2	Операционные системы, введение	Назначение ОС. Современные ОС и их краткая сравнительная характеристика (ОС семейства Windows, ОС семейства UNIX, MacOS).	Лекции, лабораторные работы
3	Файловые системы	Файловые системы (древовидные) на примере FAT/NTFS. Логические диски. Каталоги. Имя файла. Расширение. Путь к файлу. Пользовательский интерфейс. Файловые системы UNIX.	Лекции, лабораторные работы
4	Командная строка	Основные внутренние команды консоли (смена диска, каталога, копирование, удаление, перенос, создание каталога, пролистывание содержания, запуск, поиск файлов, команды перенаправления вывода). Интерфейс командной строки (cmd.exe), его особенности. Пакетные файлы (без команд организации циклов). Команды текстовой строки различных ОС.	Лекции, лабораторные работы
5	Графический интерфейс MS Windows	Особенности и основные элементы графического интерфейса пользователя MS Windows (окна, меню, панель задач, меню «Пуск», рабочий стол, пиктограммы и их свойства). Работа с использованием клавиатуры и мыши, основные клавиатурные комбинации. Проводник Windows – работа с файлами.	Лекции, лабораторные работы

6	Структура и настройка Windows	Варианты загрузки Windows. Панель управления. Установка и удаление шрифтов, принтеров, программ, устройств, клавиатура, настройка языков, настройка даты/времени.	Лекции, лабораторные работы
7	Сжатие и архивация данных. Файловые утилиты. Файловые менеджеры.	Принципы работы архиваторов. Сжатие текста, графики и мультимедиа-информации, с потерей и без потери качества. Программы обслуживания жесткого диска. Оптимизация размещения пользовательских файлов. Назначение файловых менеджеров. Основные операции с файлами и каталогам (копирование, создание, удаление, перемещение, редактирование). Пользовательское меню FAR/Total Commander, plug-ins.	
8	Введение в компьютерные сети. Локальные сети	Глобальные, региональные и локальные сети. Адресация, настройки, проблемы, перспективы. Назначение компьютерных сетей. Одноранговые сети и сети с выделенным сервером. Протоколы. Стек протоколов TCP-IP. Конфигурация и настройка сети в ОС Windows. Сетевые диски. Работа в сети с помощью проводника Windows. Утилиты работы в сети: ping, tracert, ftp, telnet, ssh, nslookup, ipconfig - краткий обзор. Беспроводные сети, защита.	Лекции, лабораторные работы
9	Интернет	История развития Интернета. URL. Обзор основных сервисов предоставляемых Интернетом и программ для работы с ними: e-mail (Microsoft Outlook, TheBat), WWW (Browser), Ftp (ftp-клиенты). Подключение к Интернету (DialUp, DSL, LAN). Поиск информации в Интернете: подходы, основные поисковые машины, порталы, расширенный научный поиск.	Лекции, лабораторные работы
10	Компьютерная безопасность, в т.ч. сетевая. Защита информации.	Вирусы, трояны, spyware, rootkits — классификация и характеристика. Способы заражения. Возможные последствия. Меры предосторожности. Защита от вирусов. Антивирусы и брандмауэры, защита от спама. Резервное копирование данных. Особенности защиты компьютера в глобальных сетях.	Лекции, лабораторные работы
11	Прикладные программы: обзор ПО	Классификация и назначение прикладных программ. Встроенные Windows-приложения. MSOffice. Графические программы. Расчетные программы.	Лекции, лабораторные работы
	Текстовые редакторы	Текстовые редакторы. Назначение текстовых редакторов. MSWord и альтернативы. Настройки. Создание/загрузка/сохранение документов в различных форматах. Перемещение по документу, виды отображения. Оформление текста без использования	Лекции, лабораторные работы

		<p>стилей (шрифты, абзацы). Поиск/замена текста. Оформление с использованием стилей. Создание/изменение/удаление стилей. Специальное форматирование: страница, табуляция и табличный редактор, списки, колонтитулы, разбиение текста на колонки.</p> <p>Математические формулы. Иллюстрации: импорт и размещение. Средства автоматизации: автоматическая генерация содержаний, указателей, списков (иллюстраций, подписей, ссылок на подписи), поля (fields), сортировка. Шаблоны. Проверка правописания. Вывод на печать.</p>	
12	Использование электронных таблиц	<p>MS Excel. Назначение электронных таблиц. Создание/загрузка/сохранение таблиц в различных форматах. Добавление и удаление листов из рабочей книги. Форматирование и автоформатирование таблиц. Построение диаграмм. Расчеты в таблицах. Фильтрация. Шаблоны.</p>	Лекции, лабораторные работы
13	Подготовка презентаций	<p>MS PowerPoint. Принципы построения лекционного материала. Онлайн-системы подготовки презентаций. Prezi.com.</p>	Лекции, лабораторные работы
14	<p>Работа с источниками информации в химии</p> <p>Первичные источники научно-технической информации (НТИ).</p>	<p>Журналы как первоисточники — печатные и электронные. Импорт-фактор журнала.</p> <p>Электронный каталог печатной подписки ИОХ РАН http://www.ioc.ac.ru/lib_journals/index.html</p> <p>Проект Научная электронная библиотека (www.elibrary.ru).</p> <p>Доступ к полным текстам журналов через электронную библиотеку РФФИ, через НЕИКОН. Возможность полнотекстового поиска на сайтах издательств. Поиск по специальным полям — ISSN. DOI</p> <p>Каталоги БЕН РАН и ВИНТИ РАН.</p> <p>Поиск с использованием Google Scholar (http://scholar.google.com/).</p> <p>Сайт с перечислением журналов по естественным наукам и издателям этих журналов (ChemPort CAS)</p> <p>Поиск конкретных работ (статей из научных журналов) с использованием системы CrossRef (DOI)</p>	Лекции, лабораторные работы
15	Вторичная научно-техническая информация	<p>Производители НТИ и вендоры. Классификация баз данных — библиографические, структурно-химические, фактографические, полнотекстовые. Библиографические БД. STN International как крупнейший источник библиографических баз данных по научно-техническим дисциплинам (www.cas.org). Дополнительная возможность —</p>	Лекции, лабораторные работы

		<p>поиск по цитированию — БД CA, CAPlus, SCISEARCH (он же Web of Science), SCOPUS.</p> <p>Принципы индекса цитирования на платформе Web of Knowledge Related articles.</p> <p>Импакт-фактор журналов (база данных JCR на платформе Web of Knowledge).</p>	
16	<u>SCOPUS</u>	<p>Какое количество наименований журналов включено в SCOPUS? Есть ли патенты в SCOPUS?</p> <p>Поиск по автору. Предметный поиск.</p> <p>Операторы AND, OR, AND NOT (Boolean operators - булевские операторы). Операторы PRE/n, W/n (proximity operators)</p> <p>Example</p> <ul style="list-style-type: none"> • pain W/15 morphine finds articles in which "pain" and "morphine" are no more than 15 terms apart. • behavioural PRE/3 disturbances finds articles in which "behavioural" precedes "disturbances" by three or fewer words. <p>Символы усечения (wild cards, truncation symbols).</p> <p>Функция анализа (по авторам, названиям организаций, наименованиям журналов, году публикации и т.д.)</p> <p>Сортировка ответов (по цитированию, по дате и др.)</p> <p>h-index (индекс Хирша).</p>	Лекции, лабораторные работы
17	Web of Science на платформе Web of Knowledge	<p>Базы данных на платформе Web of Knowledge.</p> <p>Какое количество наименований журналов включено в Web of Science?</p> <p>Есть ли патенты в Web of Science?</p> <p>Есть ли патенты в Web of Knowledge?</p> <p>Поиск по автору. Предметный поиск.</p> <p>Операторы AND OR NOT (Boolean operators булевские операторы). Операторы SAME NEAR. Символы усечения (wild cards, truncation symbols). Лемматизация.</p> <p>Функция анализа (по авторам, названиям организаций, наименованиям журналов, году публикации и т.д.)</p> <p>Сортировка ответов (по цитированию, по дате и др.)</p>	Лекции, лабораторные работы
18	Информационные ресурсы издательства Chemical Abstracts	<p>Библиографическая база данных Chemical Abstracts.</p> <p>Какое количество наименований журналов включено в Chemical Abstracts?</p> <p>Есть ли патенты в Chemical Abstracts?</p> <p>Можно ли делать поиск по цитированию в Chemical Abstracts?</p>	Лекции, лабораторные работы

	Service (CAS)	<p>Структурно-химическая база данных Registry производства CAS. Регистрационный номер CAS - основные источники CAS RNs (регистрационных номеров CAS).</p> <p>http://www.cas.org/expertise/cascontent/registry/index.html</p> <p>Структурно-химическая база данных CASREACT. Что такое mapping и marking? Отличие reactant и reagent.</p> <p>SciFinder/SciFinderShcolar – информационно-поисковая система производства CAS.</p> <p>http://www.cas.org/expertise/cascontent/ata glance/</p> <p>Какие базы данных входят в состав SciFinder?</p> <p>Практическое занятие — поиск вещества, поиск реакции. Можно ли искать соединение по тривиальному названию? Можно ли искать соединение по CAS Rn?</p> <p>Функция анализа (по авторам, названиям организаций, наименованиям журналов, году публикации и т.д.)</p> <p>Функция анализа для результатов поиска по веществу или реакции. Сортировка ответов (по цитированию, по дате и др.)</p>	
19	REAXYS	<p>Какие базы данных входят в REAXYS?</p> <p>Можно ли искать соединение по тривиальному названию?</p> <p>Можно ли искать соединение по CAS Rn?</p> <p>Функция анализа (по авторам, названиям организаций, наименованиям журналов, году публикации и т.д.)</p> <p>Функция анализа для результатов поиска по веществу или реакции. Сортировка ответов (по цитированию, по дате и др.)</p>	Лекции, лабораторные работы
20	Графика Общие вопросы работы с графикой	<p>Растровая и векторная графика. Форматы графических файлов и их особенности (TIFF, JPEG, BMP, GIF, PNG, PCX, EPS), программные форматы, язык PostScript, компрессия файлов. Пример совмещения компрессированной графики и текста - формат PDF. Источники компьютерных изображений (сканирование, цифровые снимки, библиотеки изображений, Интернет, рисование, специализированные программы, научные приборы). Зависимость параметров графических файлов от их назначения. Обзор основных графических программ.</p>	Лекции, лабораторные работы
21	Растровая графика	<p>Назначение. Недостатки и достоинства. Классификация. Разрешение в зависимости от назначения, особенности масштабирования. Цифровая фотография, сканирование.</p>	Лекции, лабораторные работы

		Основные приемы редактирования изображений в Adobe Photoshop.	
22	Векторная графика	Назначение. Недостатки и достоинства. Особенности рисования и редактирования, основные графические инструменты векторной графики. Выделение, преобразование и упорядочивание объектов.	Лекции, лабораторные работы
23	Научная и деловая графика	Основные виды диаграмм, значение в научном исследовании. Подготовка исходных данных, их дополнительная математическая обработка. Принципы оформления, наглядность, типовые ошибки. Оси, засечки, сетка, подписи, размерности, шкалы, легенда, объединение данных.	Лекции, лабораторные работы
24	Химическая графика	Основные химические графические примитивы и особенности их использования. Типовые ошибки при наборе. Рисование кривых, кривая Безье, карандаш. Группировка и упорядочивание объектов. Особенности набора формул для химической базы данных. Стилизовое оформление. Способы оптимизации набора химических структур. Шаблоны и заготовки. Использование текста в химических уравнениях, набор специальных символов. Перенос в программы редактирования текста.	Лекции, лабораторные работы
25	Компьютерное моделирование геометрических и энергетических характеристик молекул.	Молекулярная механика: теоретические основы, возможности метода и основные трудности. Принципы молекулярных расчетов. Расчетные программы на основе молекулярной механики. Молекулярная динамика. Общее представление о полуэмпирических и неэмпирических методах квантовой химии. Компьютерные расчеты соотношений «структура-свойство».	Лекции, лабораторные работы

ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНЫХ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

№ п/п	№ раздела дисциплины	Тема практических занятий
1	Аппаратное обеспечение и ОС	Аппаратное обеспечение и тенденции его развития
2		Эффективное использование графического интерфейса
3		Важнейшие и редко используемые возможности Windows
1	Компьютерные сети, файлы	Возможности компьютерной сети: локальной и глобальной
2		Интернет и безопасность

3		Подготовка научных материалов с учётом возможностей HTML (XML)
1	Работа с источниками информации в химии	Поиск вещества, поиск реакции, поиск фактографической информации, поиск по библиографической части БД.
1 2 3	Прикладное программное обеспечение	Электронные таблицы, как основа первичной оценки материала Культура оформления текста Фрагментирование информации для формирования БД
1 2 3	Графика	Источники и назначение графики Химическая графика и критические ошибки её набора Отечественные и международные правила оформления диаграмм
1	Молекулярный дизайн	Расчеты энергетики молекулы, геометрических параметров. Докинг как метод определения комплементарности координирующихся молекул.

5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции и практические работы.
2. Сопровождение лекций визуальным материалов в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций Microsoft Office Powerpoint), проецируемых на экран с помощью видеопроектора, а также результатов компьютерного моделирования физико-химических процессов.
3. Проведение практических работ в компьютерном практикуме, участие обучаемых в научной работе в области вычислительной химии и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

Форма контроля знаний – три контрольных и экзамен в конце курса, включающий теоретические вопросы и задачу.

Средства обеспечения освоения дисциплины

Для успешного прохождения курса используются размещенные в сети Интернет учебные информационные ресурсы. В частности, специально созданный для аспирантов сайт, на котором оперативно размещаются необходимые учебные, методические и контрольно-измерительные материалы.

- Основы работы в Word for Windows.
- Работа с графикой.
- Набор математических уравнений.
- Подходы к работе с базами данных.
- Архиваторы, вирусы.
- Работа в электронных таблицах.
- Файловая система, DOS, командная строка.
- Работа с HTML.
- Компьютерные сети, сеть Internet, её структура и современные особенности.

Изучение курса предполагает наличие у аспирантов простейших навыков пользователя компьютера, доступа в сеть Интернет и адреса электронной почты. В процессе изучения курс считается усвоенным, если аспиранты научатся:

- использовать графический интерфейс, проводить настройку ОС Windows;
- подбирать и конфигурировать аппаратное обеспечение современного компьютера в зависимости от поставленной задачи;
- анализировать строение и назначение локальных сетей и Интернета, уметь использовать эти знания на практике;
- самостоятельно разрабатывать страницы на HTML;
- использовать в повседневной практике вспомогательные программы: утилиты, архиваторы, антивирусное ПО;
- производить необходимые расчеты в электронных таблицах, строить диаграммы и графики;
- создавать презентации в среде PowerPoint;
- подготавливать графические файлы в зависимости от их назначения;
- оформлять тексты любой категории сложности на основе современных стандартов.

Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения учебного процесса имеется оборудованный 16-ю современными компьютерами класс, с подключением к Интернету, а также

- изданный сотрудниками ИОХ РАН учебник «Компьютерный набор химических текстов в среде ChemWindow»;
- методические и учебные материалы на сайте.

Доступ к базам данных:

- Chemical Abstracts (CAS on CD, 1996-2011);
- Кембриджский структурный банк данных (CASD), обновление ежегодное;
- REAXYS, база данных органических и неорганических реакций, доступ обновляется ежегодно;
- SCIFinder, база данных органических и неорганических реакций, доступ обновляется ежегодно.

КОНТРОЛЬНЫЕ РАБОТЫ, ЗАЧЕТНЫЕ ЗАДАНИЯ

ГРАФИКА

1. Основные форматы графических файлов и их назначение.
2. Виды растровой графики, классификация, назначение.
3. Принципы масштабирования растровой графики.
4. Разрешение изображения в зависимости от назначения.
5. Достоинства и недостатки векторной и растровой графики.
6. Особенности векторной графики, разновидности.
7. Понятие векторизации. Насколько реальна векторизация и почему?
8. Сканер: назначение, методика сканирования, основные параметры.

ПРЕЗЕНТАЦИОННАЯ ГРАФИКА

Подготовка индивидуальной презентации по заданию

БАЗЫ ДАННЫХ

Практическое занятие — поиск вещества, поиск реакции, поиск фактографической информации, поиск по библиографической части БД.

Содержание методов контроля:

Теоретическая часть

1. Основные компоненты компьютера (в т.ч. системного блока), краткая характеристика
2. Устройства хранения информации, общая характеристика, достоинства и недостатки
3. Устройства ввода и вывода информации, общая характеристика, достоинства и недостатки
4. Способы подключения внешних устройств к компьютеру, общая характеристика, достоинства и недостатки
5. Операционные системы, типы ОС (многозадачные, многопользовательские, с графическим интерфейсом, и т.д.)
6. Организация хранения данных на запоминающих устройствах (файловые системы)
7. Основные команды командной строки Windows

8. Общее описание графического интерфейса windows
9. Панель управления и панель администрирования windows
10. Сети – способы организации физических соединений компьютеров (витая пара, коаксиал, wi-fi, модемы, и т.п.)
11. Сети – протоколы, стек протоколов.
12. Сети – адресация в сетях (IP, DNS, WINS/NETBIOS)
13. Основные сервисы Интернета – краткий обзор
14. WWW – подробный обзор, что где искать и как
15. E-Mail – подробный обзор. Спам и методы борьбы с ним
16. Виды подключения к Интернету. Примерные скорости и уровни цен, достоинства и недостатки
17. HTML – основы
18. HTML – программы написания и редактирования
19. HTML – оформление таблицами и слоями (<DIV>)
20. Компьютерная безопасность в целом (кратко)
21. Виды malware [вирусы, spyware, adware, трояны] и способы борьбы с ними
22. Особенности безопасности при подключении к Интернету и без него
23. Файловые менеджеры на основе NC – основы работы с ними
24. Проводник windows – основы работы
25. Сжатие данных – общие принципы
26. Сжатие данных с потерями и без – практическое применение для различных случаев
27. Excel – краткий обзор возможностей программы
28. PowerPoint – составление презентаций на основе существующих шаблонов
29. PowerPoint – составление собственных шаблонов презентаций
30. PowerPoint – как подготовиться к докладу.
Adobe Illustrator
31. Опишите два способа изменения размера документа.
32. Какие инструменты используются для создания основных фигур? Опишите, как отсоединить или отделить группу инструментов создания фигур от панели инструментов.
33. Как нарисовать квадрат?
34. Как нарисовать треугольник?
35. Опишите три способа задания размеров фигуры.
36. Каков самый быстрый способ поменять местами цвет штриха объекта с цветом его заливки?
37. Как нарисовать прямоугольную сетку? Как можно управлять размером сетки и размером ее ячеек?
38. Опишите три способа заливки объекта цветом.
39. Как можно сохранить цвет?
40. Как задать название цвета?
41. Как восстановить исходный набор цветов на палитре Swatches (Образцы)?
42. Как закрасить фигуру прозрачным цветом?
43. Как можно быстро просмотреть все образцы узоров на палитре Swatches (Образцы)?
44. Опишите, как нарисовать прямую вертикальную, горизонтальную или диагональную линии с помощью инструмента Pen (Перо).
45. Как нарисовать кривую линию с помощью инструмента Pen (Перо)?
46. Как нарисовать угловую точку на кривой линии?
47. Как заменить точку гладкости на кривой угловой точкой?

48. Какой инструмент можно использовать для редактирования сегмента кривой линии?
49. Каким образом можно выделять и манипулировать отдельными объектами и группе?
50. Как изменить размеры объекта? Как можно задать точку, от которой отсчитываются координаты объекта? Как изменить размеры группы объектов пропорционально?
51. Какие преобразования можно выполнять с помощью инструмента Transform (Преобразование)?
52. Что показывает диаграмма в диалоге Transform (Преобразование), и как она влияет на преобразования?
53. Каков простой способ изменения перспективы? Перечислите другие три типа преобразований, которые можно выполнить с помощью инструмента Free Transform (Произвольное преобразование).
54. Опишите три способа ввода текста в рисунок.
55. Как изменить интерлиньяж между строками в абзаце? Как изменить интерлиньяж между абзацами?
56. Опишите два способа изменения в тексте шрифта и его размера.
57. Как можно разделить контейнер текста на меньшие контейнеры?
58. Как создать текст, который следует контурам направляющих или объекта?
59. Зачем преобразуют текст в контуры?
60. Как создать текстовую маску?
61. Как создать PDF-версию документа Illustrator для онлайн-просмотра?
62. Что такое заливка градиентом?
63. Назовите два способа заливки градиентом выделенного объекта.
64. В чем разница между заливкой градиентом и переходом?
65. Как настроить переход между цветами в заливке градиентом?
66. Как добавить цвета в заливку градиентом?
67. Как настроить направление в заливке градиентом?
68. В чем разница между выбором перехода со сглаженными цветами и заданием числа шагов в переходе?
69. Назовите два преимущества использования слоев при создании рисунка.
70. Как можно скрывать слои? Как можно отображать отдельные слои?
71. Опишите способы изменения порядка слоев в файле.
72. Как можно заблокировать слои?
73. С какой целью изменяют цвет выделения в слое?
74. Что произойдет, если вставить многослойный файл в другой файл? Чем полезна команда Paste Remembers Layers (Вставить скопированные слои)?
75. Как можно перемещать объекты с одного слоя на другой?
76. Как применить эффект к слою? Как можно отредактировать эффект?
77. Как отредактировать текст, заключенный в контур?
78. Как влияют цветовые гаммы RGB и CMYK на соотношения между экранными цветами и печатными цветами?
79. Как можно создать близкое совпадение между экранными цветами и печатными цветами?
80. Что означает термин цветоделение?
81. Опишите разницу между связыванием и встраиванием размещенного файла в Illustrator.
82. Опишите способ замены в документе помещенного изображения другим изображением.
83. Что определяет формат файлов, которые нужно использовать при сохранении изображений для публикаций в Web?

84. В чем состоит преимущество выбора палитры Web при подготовке изображений для публикации в World Wide Web?
85. Поддерживает ли формат JPEG прозрачность?

Практическая часть

1. Разобрать/собрать системный блок, назвать все компоненты, проверить работоспособность
2. Найти неисправность в компьютере
3. Написать пакетный файл .bat по заданию
4. Установить шрифт в windows. Настроить компьютер для работы в сети (IP, маска подсети, DNS, шлюз, безопасность)
5. Определить проблему в сети (использовать ipconfig, tracert, ping, nslookup)
6. Создать почтовый ящик на любом бесплатном сервере, настроить MS Outlook для работы с ним, отправить себе письмо с вложением, получить его [либо программа-клиент на выбор – Bat, Opera ...]
7. Написать небольшую HTML страничку по заданию
8. Работа с архиватором в режиме командной строки (rar)
9. Работа с GUI архиватором (winrar)
10. Построение диаграмм в Excel
11. Подключение и настройка сканера, принтера, проектора, работа с периферийными устройствами.

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ БИЛЕТЫ

БИЛЕТ №1

1. Основные компоненты компьютера (в том числе системного блока), краткая характеристика.
2. Способы создания макропрограмм, их назначение.
3. Установить принтер (сетевой или локальный)

БИЛЕТ №2

1. Устройства хранения информации, общая характеристика, достоинства и недостатки.
2. Назначение макропрограмм. Примеры.
3. Разместить рисунок в документе, обрезать его и изменить размеры.

БИЛЕТ №3

1. Устройства ввода и вывода информации, общая характеристика, достоинства и недостатки.
2. Причины необходимости дополнительного редактирования последовательности действий, записанной в макропрограмме.
3. Набрать математическое уравнение.

БИЛЕТ №4

1. Способы подключения внешних устройств к компьютеру, общая характеристика, достоинства и недостатки.
2. Назначение макропрограмм. Примеры.
3. Найти в Интернете информацию по заданию.

БИЛЕТ №5

1. Операционные системы, типы ОС (многозадачные, многопользовательские, с графическим интерфейсом, и т.д.).
2. Операторы перехода Visual Basic for Applications (If, Select Case, GoTo).
3. Создать почтовый ящик на любом бесплатном сервере, настроить MS Outlook (либо на выбор — Vat, Opera...) для работы с ним, отправить себе письмо с вложением, получить его.

БИЛЕТ №6

1. Организация хранения данных на запоминающих устройствах (файловые системы).
2. Операторы организации циклов Visual Basic for Applications (do, for, while).
3. Построить диаграмму в Excel.

БИЛЕТ №7

1. Основные команды MS-DOS. Пакетные файлы.
2. Способы вставки простейших диалогов в макропрограммы.
3. Произвести вычисления в Excel по предложенной таблице.

БИЛЕТ №8

1. Общее описание графического интерфейса Windows, способы и приемы работы.
2. Назначение баз данных, основные понятия.
3. Набрать химическую структуру, вставить ее в текст.

БИЛЕТ №9

1. Основные элементы панели управления, назначение и использование (Add or Remove Programs, Date and Time, Display, Regional and Language Options, User Accounts).
2. Основные типы информации, хранимой в базах данных и типы полей, особенности их обработки и сортировки.
3. Написать пакетный файл по заданию.

БИЛЕТ №10

1. Элемент System панели управления (структура, Pagefile, Device Manager). Свойства экрана (Desktop).
2. Назначение индексов в базах данных.
3. Написать HTML-страничку по заданию. Обязательные элементы: относительная ссылка на локальный HTML-документ в папке, Интернет-ресурс — с открытием в новом окне, таблица, список, заголовок страницы и в тексте, все начертания, индексы (верхние и нижние), греческие буквы.

БИЛЕТ №11

1. Панель администрирования windows. Пользователи Windows, группы пользователей, ограничение прав пользователя, просмотр событий.
2. Понятие справочников баз данных, их назначение.
3. Найти в Интернете информацию по заданию.

БИЛЕТ №12

1. Обзор кодировок шрифтов. Управление шрифтами.
2. Отличие систем управления базами данных (СУБД) от других программ, связанных с накоплением, поиском и обработкой информации.
3. Работа с архиватором в режиме командной строки (RAR или ZIP — по выбору). Найти программу на официальном сайте и установить, архивация с папками.

БИЛЕТ №13

1. Шрифты с точки зрения графики.
2. Нормализация базы данных: назначение, общие принципы.
3. Заархивировать файлы из указанной папки с указанием полного пути при помощи WinRar. Объяснить смысл этого действия.

БИЛЕТ №14

1. Обзор шрифтов Windows. Управление шрифтами. Кириллические кодировки: UTF, КОИ, 866, Windows-1251 — описание и области применения.
2. Основные принципы оформления текста, проверка правописания и расстановка переносов.
3. Решить систему линейных уравнений в Maple. Ответ с точностью до x знака.

БИЛЕТ №15

1. Сети — способы организации физических соединений компьютеров (витая пара, коаксиальный кабель, wi-fi, модемы, и т.п.). Достоинства и недостатки.
2. Текстовые редакторы Windows — сравнительный обзор.
3. Решить ДУ и систему ДУ в Maple.

БИЛЕТ №16

1. WWW — краткий обзор. Поиск информации в Интернете: подходы, основные поисковые машины, порталы.
2. Перемещение по тексту, выделение, копирование, вставка (на примере Word).
3. Построить 2D и 3D графики в Maple.

БИЛЕТ №17

1. Сети — адресация в сетях (IP, DNS, WINS/NETBIOS).
2. Вставка специальных символов в текст через меню и с помощью клавиатуры. Маркированные и нумерованные списки.
3. Нахождение пределов, интегралов и производных в Maple.

БИЛЕТ №18

1. Основные сервисы Интернета — краткий обзор.
2. Поиск и замена текста в Word for Windows.
3. Построить 2D и 3D графики в Maple.

БИЛЕТ №19

1. WWW — краткий обзор. Поиск информации в Интернете: подходы, основные поисковые машины, порталы.
2. Разделы (Sections) в текстовом документе: создание и назначение.
3. Создать слайд в PowerPoint по заданию.

БИЛЕТ №20

1. e-Mail — обзор методов приема-передачи почтовых сообщений. Спам и методы борьбы с ним. Параметры настройки учетной записи почтового клиента.
2. Оформление текста с использованием стилей в Word.
3. Построить диаграмму в Excel.

БИЛЕТ №21

1. Виды подключения к Интернету. Предельные и реальные скорости для разных видов подсоединения, достоинства и недостатки.
2. Оформление колонтитулов в текстовом документе.
3. Произвести вычисления в Excel по предложенной таблице.

БИЛЕТ №22

1. HTML — структура файла, стилевое оформление.
2. Оформление сносок в текстовом документе.
3. Набрать химическую структуру, вставить ее в текст.

БИЛЕТ №23

1. Принципы веб-дизайна.
2. Оформление закладок (bookmarks) в текстовом документе.
3. Создать, присвоить и изменить стиль в документе Word for Windows.

БИЛЕТ №24

1. HTML — программы написания и редактирования.
2. Факторы, влияющие на вместимость страницы в текстовом редакторе, допустимость их изменения.
3. Уместить предложенный текст на одной странице текстового редактора, не производя заметных искажений оформления.

БИЛЕТ №25

1. HTML — оформление таблицами и слоями (<DIV>).
2. Основные параметры форматирования символов.
3. Разместить рисунок в документе, обрезать его и изменить размеры.

БИЛЕТ №26

1. Компьютерная безопасность в целом.
2. Основные параметры форматирования абзаца.
3. Создать, присвоить и изменить стиль в документе Word for Windows.

БИЛЕТ №27

1. Виды malware [вирусы, spyware, adware, трояны] и способы борьбы с ними.
2. Набор математических уравнений: способы и правила.
3. Набрать химическую структуру, вставить ее в текст.

БИЛЕТ №28

1. Особенности безопасности сетевого компьютера и компьютера, включенного в сеть.
2. Набор таблиц в Word for Windows. Табличный редактор, табуляция. Сортировка таблиц и текста.
3. Отредактировать портретную фотографию (баланс цветов, красные глаза) в Adobe Photoshop.

БИЛЕТ №29

1. Файловые менеджеры на основе интерфейса Norton Commander — основы работы с ними на примере FAR manager.
2. Импорт и размещение иллюстраций в текстовом редакторе, параметры, последующее редактирование (на примере Word).
3. Перевести файл из формата TIFF в формат JPEG без заметной потери качества. Обосновать причину изменения формата, предложить альтернативу.

БИЛЕТ №30

1. Проводник Windows — основы работы. Горячие клавиши Windows.
2. Генерация содержания в текстовом редакторе. Перекрёстные ссылки.
3. Перевести векторное изображение в формат TIFF. Обосновать необходимость изменения формата и применимость других растровых форматов.

БИЛЕТ №31

1. Сжатие данных — общие принципы.
2. Классификация графики. Отличие растровой и векторной графики, их достоинства и недостатки.
3. Отсканировать изображение на бумажном носителе (черно-белое, полутоновое, цветное). Сохранить в файл. Обосновать формат файла и параметры сканирования.

БИЛЕТ №32

1. Сжатие данных с потерями и без — практическое применение для различных случаев.
2. Форматы графических файлов и их особенности (TIFF, JPEG, GIF, BMP, PNG, EPS, PDF).
3. Произвести запись макропрограммы. Удалить лишний код. Дополнить диалогом запроса к пользователю и/или информации. Вывести кнопку для запуска на панель.

БИЛЕТ №33

1. Excel — краткий обзор возможностей программы. Связи между компонентами MS Office.
2. Источники компьютерных изображений и их особенности.
3. Разобрать/собрать системный блок, назвать все компоненты (в том числе кабели), проверить работоспособность собранного компьютера.

БИЛЕТ №34

1. Отличие таблиц в MS Word и Excel.
2. Зависимость параметров графических файлов от их назначения.
3. Набрать химическую структуру, вставить ее в текст.

БИЛЕТ №35

1. Графическое отображение таблиц Excel, в том числе с заголовками колонок и строк, и их автообновление в других приложениях.
2. Разрешение растровой графики в зависимости от назначения, особенности масштабирования.
3. Произвести запись макропрограммы. Удалить лишний код. Дополнить диалогом запроса к пользователю и/или информации. Вывести кнопку для запуска на панель.

БИЛЕТ №36

1. Способы форматирования ячеек Excel, адресация, специальная вставка.
2. Основные химические графические примитивы и особенности их использования.
3. Найти в Интернете шрифт, установить и определить его кодировку.

БИЛЕТ №37

1. PowerPoint — создание презентаций на основе существующих шаблонов.
2. Типовые ошибки при наборе химической графики.
3. Набрать химическую структуру, вставить ее в текст.

БИЛЕТ №38

1. PowerPoint — создание собственных шаблонов презентаций.
2. Особенности набора структурных формул для химической базы данных.
3. Настроить компьютер для работы в сети: IP, маска подсети, DNS, шлюз, безопасность. Записать соответствующие настройки.

БИЛЕТ №39

1. PowerPoint — принципы формирования слайдов к докладу с фиксацией времени, размер и расположение таблиц, текстовой информации и графики на слайде, использование эффектов анимации.
2. Основные виды диаграмм, значение в научном исследовании, программы для их создания.
3. Настроить ресурс общего пользования (папку), получить доступ к этому ресурсу с другого компьютера.

БИЛЕТ №40

1. Виды и особенности программ в зависимости от назначения. Тенденция к расширению и перекрыванию функциональных возможностей.
2. Поиск и замена текста в Word for Windows.
3. Набрать математическое уравнение.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Рекомендуемая литература

а) основная литература:

1. Демарко Д. Excel для профессионалов / Демарко Джим; [Шанина Е.С. (пер. с англ.)]. - М.: АСТ, 2014. - 296 с.
2. Зибарева И.В. Химические базы данных сети STN International // Известия АН. Сер. хим. 2012. No 3. С. 679-716.
3. Поддержка информационной инфраструктуры институтов РАН для развития инновационной деятельности в области химии, химической технологии и биохимии Сборник тезисов пленарных докладов на Международном семинаре, ред. В.Б. Минцев, В.П. Анаников, Б.Л. Психа, Н.В. Круковская, Л.В. Ширшова, Г.В. Малков, Черноголовка 11-14 марта 2014 г 31 с.
4. В.А. Дударев, Интеграция информационных систем в области неорганической химии и материаловедения М., URSS, 2016, 307 с.
5. Ridley D.D. Information Retrieval: SciFinder. Wiley, 2009. 214 pp.
6. Мацкявичюс Д.А. Компьютерный набор химической графики в среде ChemWindow. // Москва, ИОХ РАН, 111 с. 1997-2005 (3 издания).
7. Хуторецкий В.М. Общие представления о поиске научно-технической информации в режиме онлайн. Базы данных STN International в теледоступе. М: РХТУ, 2000. 42 с.
8. Круковская Н.В. Поиск информации о химических веществах, сплавах и полимерах с помощью базы данных Registry. М: РХТУ, 2001. 32 с.
9. Международная сеть научно-технической информации STN International: <http://www.stn-international.de> и <http://cas.org/products/stnfamily/index.html>
10. Мазаник С.В. Безопасность компьютера: защита от сбоев, вирусов и неисправностей. Москва : Эксмо, 2014. — 256 с.

б) дополнительная литература:

1. Типовые расчеты по физической и коллоидной химии: учебное пособие / Васюкова А.Н. [и др.]. - СПб. [и др.]: Лань, 2014. - 137 с.
2. Подходы к работе с базами данных. Электронное учебное пособие. 2009.
3. Цирельсон В. Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 3-е изд. - М.: БИНОМ. Лаб. знаний, 2014. - 495 с.
4. Т.Кларк. Компьютерная химия. Мир - 1990.
5. Н.С.Зефиоров, К.В.Гордеева. Компьютерный синтез. Знание - 1989.
6. Машинный поиск информации в STN International. Общие представления и доступ к системе. В.М. Хуторецкий, М. – 1994

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Базы данных и информационно-справочные порталы:

- Российский информационный портал в области науки, медицины, технологии и образования – <http://www.e-library.ru>
- Полнотекстовая база данных иностранных журналов – <http://www.sciencedirect.com>
- Электронная библиотека РРФФИ <http://www.rfbr.ru/rffi/ru/books>
- База данных – <http://www.scifinder.cas.org>
- Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>
- Портал фундаментального химического образования России - www.chem.msu.ru
- CAS Learning Solutions: <http://www.cas.org/training/scifinder/>
- ИПС Reaxys: <http://www.reaxys.com>
- Программные средства: MS Windows 10 Pro x64; MS Office Professional Plus 2013; ChemDraw 16

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

ИОХ РАН располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов теоретической и практической подготовки, предусмотренных учебным планом, а также эффективное выполнение диссертационной работы:

Аудитория для проведения лекций, оснащенная компьютером и проектором для показа слайдов компьютерных презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.