


Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Кувардин Николай Владимирович
Должность: Заведующий кафедрой
Дата подписания: 10.09.2023 20:26:42
Уникальный программный ключ:
9e48c4318069d59a383b8e4c07e4eba99aa1cb28

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:
И.о. заведующий кафедрой
фундаментальной химии и
химической технологии
(наименование кафедры полностью)

 Н.В. Кувардин
(подпись)

«31» августа 2023 г.

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА
для текущего контроля успеваемости
и промежуточной аттестации обучающихся
по дисциплине

Компьютерные технологии в химии
(наименование дисциплины)

04.04.01 Химия
(код и наименование ОПОП ВО)

Курск – 2023

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ

1.1 ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ В ТЕСТОВОЙ ФОРМЕ

Тема 1. Мир информации и глобальные сети

1. Компьютер – это...

- а) это такой комплекс оборудования, который способен выполнять любые указания человека;
- б) многофункциональное программируемое устройство, позволяющее вводить, обрабатывать и выводить информацию, решая различные прикладные задачи;
- в) это электронное устройство, которое выполняет операции ввода информации, хранения и обработки ее по определенной программе;
- г) устройство, которое так же, как и человек, получает информацию, хранит и обрабатывает ее, обменивается ею с другими компьютерами;
- д) устройство, способное принимать данные, выполнять над ними указанные операции.

2. Технология – это...

- а) комплекс организационных мер, операций и приемов, направленных на изготовление, обслуживание, ремонт и/или эксплуатацию изделия;
- б) совокупность методов, процессов и материалов, используемых в какой-либо отрасли деятельности;
- в) устройства для распределения (доставки) сообщений, включая почтовые системы;
- г) промышленные или иные процессы, которые предполагают использование научных или других знаний для решения определенных проблем или выпуска определенной продукции.

3. Информация – это...

- а) любые сведения, которые интересуют конкретного человека в конкретной ситуации;
- б) методические указания, рекомендации, статьи, рефераты докладов, документы и т.п.;
- в) сведения о лицах, предметах, фактах, событиях, явлениях и процессах независимо от формы их представления;
- г) сведения об объектах и явлениях окружающей среды, их параметрах, свойствах и состояниях, которые уменьшают имеющуюся о них степень неопределенности;
- д) совокупность данных, повышающих уровень знаний об объективной реальности окружающего мира.

4. Информационная технология – это...

- а) совокупность методов и приемов решения типовых задач обработки информации;
- б) программное обеспечение, используемое для решения типовых задач обработки информации;
- в) технические устройства, используемые при решении типовых информационных задач;
- г) способ организации труда разработчиков и пользователей при решении типовых информационных задач;
- д) совокупность методов, производственных процессов и программно-технических средств, объединенных в технологическую цепочку, обеспечивающую сбор, обработку, хранение, распространение и отображение информации.

5. К свойствам информации относятся следующие:

- а) объективность;
- б) объемность;

- с) актуальность;
 - д) полнота;
 - е) субъективность.
6. Доступность информации – это...
- а) состояние информации, при котором субъекты, имеющие право доступа, могут реализовывать их беспрепятственно;
 - б) степень соответствия информации текущему моменту времени;
 - с) независимость от чьего-либо мнения или сознания;
 - д) мера возможности получить информацию.
7. Информацию измеряют ...
- а) количеством новизны;
 - б) числовой характеристикой сигнала, характеризующую неопределенность, которая исчезает после получения сообщения в виде данного сигнала;
 - с) количеством символов в сообщении;
 - д) обычновенным голосованием;
 - е) в уменьшении неопределённости наших знаний об объекте.
8. Информационный продукт – это:
- а) документированная информация, представленная в форме товара;
 - б) электронная книга, выставленная для свободного распространения;
 - с) программное обеспечение, выполненное на заказ;
 - д) обучающий курс, разработанный для конкретного случая;
 - е) результат любой информационной деятельности.
9. Перевод текста с английского языка на русский является процессом:
- а) обработки информации;
 - б) хранения информации;
 - с) передачи информации;
 - д) поиска информации;
 - е) ни одним из перечисленных выше процессов.
10. Наибольший объем информации человек получает при помощи:
- а) осязания;
 - б) слуха;
 - с) обоняния;
 - д) зрения;
 - е) вкусовых рецепторов.
11. Какое общество можно назвать «Информационное общество»:
- а) общество, в котором большинство работающих занято производством, хранением, переработкой и реализацией информации;
 - б) общество, в котором основной производительной силой выступают знания и информация;
 - с) общество, характеризующееся высоким уровнем производства и потребления;
 - д) новая историческая фаза развития цивилизации, в которой главными продуктами производства являются информация и знания;
 - е) общество, которое в культурном, психологическом, социальном и экономическом отношениях формируется под воздействием техники и электроники.
12. Человек обладает информационной культурой, если
- а) его деятельность связана с областью культуры;
 - б) его уровень знаний, позволяет свободно ориентироваться в информационном пространстве;
 - с) соблюдает совокупность норм, правил и стереотипов поведения, связанных с информационным обменом в обществе;
 - д) обладает разносторонним умением поиска нужной информации;

- e) умеет с достаточной скоростью вводить информацию с клавиатуры компьютера;
 - f) соблюдает этические нормы при публикации информации в Интернет.
13. Первые механические вычислительные устройства (арифмометры) разработали:
- a) Б. Паскаль;
 - b) Г. Лейбниц;
 - c) Ч. Беббидж;
 - d) Дж. Фон Нейман;
 - e) Ада Лавлейс.
14. Основные принципы функционирования ЭВМ сформулировали:
- a) Б. Паскаль;
 - b) Г. Лейбниц;
 - c) Ч. Беббидж;
 - d) Дж. Фон Нейман;
 - e) Ада Лавлейс.
15. Принцип хранимой программы предложил:
- a) Бэббидж;
 - b) Тьюринг;
 - c) Фон Нейман;
 - d) Ньютон.
16. К числу основных принципов функционирования ЭВМ не относится
- a) принцип хранимой программы;
 - b) принцип управляющей команды;
 - c) принцип модульной структуры компьютера;
 - d) принцип использования сверхбыстрой памяти для выполнения операций;
 - e) принцип центрального управления компьютером с помощью процессора.
17. Первая действующая ЭВМ называлась:
- a) Марк-1;
 - b) Колосс;
 - c) Урал;
 - d) ENIAC.
18. Самые мощные суперЭВМ представлены серией:
- a) PC;
 - b) Macintosh;
 - c) Cray;
 - d) Apple.
19. Появление 3-го поколения ЭВМ было обусловлено:
- a) переходом от ламп к транзисторам;
 - b) переходом от транзисторов к интегральным микросхемам;
 - c) переходом от интегральных микросхем к микропроцессору;
 - d) переходом от транзисторов к большим интегральным схемам.
20. . Первая интегральная микросхема родилась в:
- a) 1959;
 - b) 1947;
 - c) 1974;
 - d) 1961.
21. Первый массовый персональный компьютер был выпущен фирмой
- a) Apple;
 - b) IBM;
 - c) Acer;
 - d) HPasscard.
22. Подавляющее большинство современных машин являются:
- a) арифметико-логическими машинами;

- b) машинами Тьюринга;
- c) фон-неймановскими машинами;
- d) релейными машинами.

23. Архитектура – это ...

- a) общие принципы построения ЭВМ, реализующие программное управление работой и взаимодействием основных ее функциональных узлов;
- b) общие принципы построения ЭВМ, не реализующие программное управление работой;
- c) дизайн внешнего вида ЭВМ;
- d) принцип соединения внешних устройств к ЭВМ.

24. В минимальную комплектацию ПК входят:

- a) мышь, монитор, клавиатура, системный блок;
- b) системный блок, дисплей, клавиатура, принтер;
- c) дисплей, системный блок, клавиатура;
- d) клавиатура, жесткий диск, сканер, принтер;
- e) монитор, системный блок, мышь, винчестер.

25. В системном блоке компьютера находятся:

- a) процессор, внутренняя память, CD-ROM, контроллеры внешних устройств, блок питания;
- b) процессор, внутренняя память, дисковод, сканер, блок питания;
- c) процессор, внешняя память, контроллеры внешних устройств, блок питания, дисплей;
- d) оперативная память, видеокарта, звуковая карта, кулер, блок питания.

26. На материнской плате компьютера находятся:

- a) драйверы, процессор, контроллеры;
- b) ОЗУ, процессор, слоты;
- c) контроллеры, ОЗУ, винчестер;
- d) чипсет; кэш-память, постоянная память.

27. Центральный процессор выполняет следующие функции

- a) выполняет арифметические и логические операции;
- b) управляет процессами передачи данных;
- c) осуществляет физическое управление устройствами;
- d) контролирует состояние устройств;
- e) хранит активные программы и данные.

28. Основными характеристиками процессора являются:

- a) модель;
- b) объем оперативной памяти;
- c) тактовая частота;
- d) разрядность;
- e) скорость обращения к внешним устройствам.

29. Оперативная память компьютера – это:

- a) память, предназначенная для временного хранения данных и команд, необходимых процессору для выполнения им операций;
- b) маленькие схемы памяти, которые вставляются в материнскую плату;
- c) микросхема с записанным набором программ;
- d) место длительного хранения данных.

30. Оперативная память предназначена для

- a) выполнения арифметических и логических операций;
- b) управления процессами передачи данных;
- c) физического управления устройствами;
- d) контроля состояния устройств;
- e) хранения активных программ и данных.

31. "Любая информация в памяти компьютера состоит из и ...".
Вместо многоточия вставить соответствующие высказывания:
- a) нулей; единиц;
 - b) слов; предложений;
 - c) символов; знаков;
 - d) символов; слов;
 - e) цифр; букв.
32. Основными характеристиками памяти являются:
- a) емкость;
 - b) быстродействие;
 - c) разрядность;
 - d) тактовая частота.
33. КЭШ память предназначена для...
- a) повышения производительности процессора;
 - b) временного хранения часто используемых данных;
 - c) сохранения, накапливания и воспроизведения информации;
 - d) для хранения данных и программ, выполняемых в данный момент;
 - e) чтобы закачивать туда игры, музыку, фильмы.
34. Жесткий диск - это ...
- a) устройство ввода графической информации;
 - b) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
 - c) устройство хранения данных с произвольным доступом;
 - d) устройство хранения данных на лазерных дисках с доступом Read Only;
 - e) устройство для соединения компьютеров в глобальную сеть.
35. Плоттер - ...
- a) устройство ввода графической информации;
 - b) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
 - c) устройство хранения данных с произвольным доступом;
 - d) устройство вывода графической информации на бумажные носители;
 - e) устройство ввода управляющей информации.
36. Сканер - ...
- a) устройство ввода графической информации;
 - b) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
 - c) устройство вывода графической информации на бумажные носители;
 - d) устройство хранения данных на лазерных дисках с доступом Read Only;
 - e) устройство ввода - вывода звуковой информации;
 - f) устройство для соединения компьютеров в глобальную сеть.
37. Звуковая карта - ...
- a) устройство ввода графической информации;
 - b) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
 - c) устройство хранения данных с произвольным доступом;
 - d) устройство вывода графической информации на бумажные носители;
 - e) устройство ввода - вывода звуковой информации.
38. Сетевая плата - ...
- a) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
 - b) устройство хранения данных с произвольным доступом;
 - c) устройство для соединения компьютеров в локальную сеть;
 - d) устройство для соединения компьютеров в глобальную сеть;
 - e) устройство ввода управляющей информации.
39. Контроллеры внешних устройств - ...
- a) устройство для приема и передачи информации по телефонным каналам;
 - b) устройство передачи информации;

- c) способ обозначения сразу несколько имен файлов с помощью специальных символов;
 - d) специализированный процессор для управления внешними устройствами;
 - e) внешний носитель информации; f) участок дорожки магнитного диска.
40. CD-ROM - ...
- a) устройство ввода алфавитно-цифровой и графической информации;
 - b) устройство хранения данных с произвольным доступом;
 - c) устройство хранения данных на сменных лазерных дисках с доступом Read Only (Только для чтения);
 - d) устройство хранения данных на сменных лазерных дисках с возможностью перезаписи.
41. Сервер - ...
- a) компьютер или специализированное устройство в сети, ресурсы которого используются многими пользователями;
 - b) объект, который никогда не воздействует на другие объекты;
 - c) основная программа, которая обеспечивает работу сайта;
 - d) муниципалитет в Испании;
 - e) программный компонент вычислительной системы, выполняющий функции по запросу клиента.
42. Компьютерная сеть -
- a) группа компьютеров, размещенных в одном помещении;
 - b) объединение нескольких ЭВМ для совместного решения задач;
 - c) комплекс терминалов, подключенных каналами связи к большой ЭВМ;
 - d) мультимедийный компьютер с принтером, модемом и факсом;
 - e) система связи между двумя или более компьютерами.
43. Локальная сеть -
- a) совокупность компьютеров, объединенных на основе кабельного соединения;
 - b) совокупность компьютеров, объединенных на основе телефонных каналов связи;
 - c) комплекс объединенных компьютеров для совместного решения задач;
 - d) группа компьютеров в одном здании;
 - e) система соединения компьютеров, характеризующаяся высокой скоростью передачи информации и высокой интенсивностью обмена.
44. Что не характерно для локальной сети:
- a) большая скорость передачи информации;
 - b) большая пропускная способность сети;
 - c) возможность обмена информацией на большие расстояния;
 - d) наличие связующего для всех абонентов высокоскоростного канала для передачи информации в цифровом виде;
 - e) заранее четко ограниченное количество компьютеров, подключаемых к сети.
45. Какие линии связи используются для построения локальных сетей:
- a) только витая пара;
 - b) только оптоволокно;
 - c) только толстый и тонкий коаксиальный кабель;
 - d) витая пара, коаксиальный кабель, оптоволокно и беспроводные линии связи.
46. Модем является техническим устройством для поддержки
- a) технологий баз данных;
 - b) технологий программирования;
 - c) телекоммуникационных технологий;
 - d) офисных технологий.
47. Что такое электронная библиотека?
- a) Совокупность лексикографических баз данных, т.е. совокупность словарей, сформированных по отдельным элементам библиографического описания;

- b) База данных, содержащая библиографические описания документов;
 - c) Библиотечный каталог в машиночитаемой форме, работающий в реальном режиме времени;
 - d) Своюкупность данных, расположенных в файле, объединенных назначением хранимой информации;
48. Электронные библиотеки в Интернете содержат ...
- a) цифровые копии печатных книг;
 - b) электронные почты;
 - c) архив адресов;
 - d) справочники.
49. Какие текстовые форматы используют электронные книги?
- a) TXT;
 - b) RAR;
 - c) DOC;
 - d) APK.
50. В какой формат переводятся книги с формулами и схемами?
- a) TXT;
 - b) MP3;
 - c) PDF;
 - d) PPK.
51. Что такое chemistry Development Kit?
- a) Компьютерное программное обеспечение, библиотека для хемоинформатики и биоинформатики;
 - b) Техническое устройство для решения информационных задач;
 - c) Своюкупность методов, производственных процессов и программно-технических, объединённых в цепочку, обеспечивающую сбор, обработку, хранения, распространение и отображение информации;
 - d) Программное обеспечение для обработки информации.
52. Какой язык используется в программе chemistry Development Kit?
- a) Паскаль;
 - b) Фортран;
 - c) Basic;
 - d) Java.
53. Кто из перечисленных является создателем chemistry Development Kit?
- a) Кристофом Стейнбеком;
 - b) Раджарши Гуха;
 - c) Деннис Ритчи;
 - d) Никлаус Вирт.
54. В каком году был создан chemistry Development Kit?
- a) 2001 г.;
 - b) 2000 г.;
 - c) 2003 г.;
 - d) 1997 г.
55. Для каких междисциплинарных дисциплин предусмотрены функциональные возможности chemistry Development Kit?
- a) Психоллингвистика и Медиаведение;
 - b) Теоретическая география и Теории архитектуры;
 - c) Смежные с социологией междисциплинарные науки;
 - d) Хемоинформатика и Биоинформатика.
56. Учеными какого университета был разработан Chemistry Development Kit?
- a) Университете Нотр-Дам;
 - b) Оксфордский университет;

- c) Гарвардский университет;
 - d) Массачусетский технологический институт.
- a) 57. Какие из перечисленных функциональных возможностей предусмотрены в себя Chemistry Development Kit?
- b) Представление валентной связи молекулы и реакции;
 - c) Генерация и визуализация координат;
 - d) Подструктура и поиск шаблонов SMARTS;
 - e) Чтение и запись форматов файлов: SMILES, SDF, InChI, Mol2, CML;
 - f) Канонические идентификаторы для быстрого точного поиска;
 - g) Все варианты верны.
58. Какие функции Chemistry Development Kit предусмотрены для Хемоинформатики?
- a) 2D-диаграмм;
 - b) 3D-геометрии;
 - c) обнаружение активного сайта белка;
 - d) идентификация метаболитов базы данных путей;
 - e) поиск подструктур с использованием точных структур и интеллектуальных запросов;
59. Какие функции Chemistry Development Kit предусмотрены для Биоинформатики?
- a) 2D-диаграмм;
 - b) 3D-геометрии;
 - c) обнаружение активного сайта белка;
 - d) идентификация метаболитов базы данных путей;
 - e) поиск подструктур с использованием точных структур и интеллектуальных запросов;
- 60 Кто разработал систему ночной сборки для Chemistry Development Kit?
- a) Кристофом Стейнбеком;
 - b) Раджарши Гуха;
 - c) Деннис Ритчи;
 - d) Никлаус Вирт.
61. Как называется систему ночной сборки Chemistry Development Kit?
- a) Nightly;
 - b) Java;
 - c) SMARTS;
 - d) CML.
62. Chemistry Development Kit был создан для обеспечения общей кодовой базы. Первый выпуск исходного кода был выпущен ...
- a) 11 мая 2011;
 - b) 27 сентября 2000;
 - c) 3 мая 1997;
 - d) 5 августа 2001.
63. Продолжите фразу: Набор для разработки химии (Chemistry Development Kit) представляет собой ...
64. Чтобы уменьшить путаницу среди пользователей, был создан проект
- a) ChemoJava
 - b) Java
 - c) GNU Lesser General Public License
 - d) LGPL 2.0
64. Какая система была разработана Раджарши Гуха которая до сих пор работает в Университете Уппсалы;
- a) Систему ночной сборки Nightly;

- b) Набор для разработки химии;
- c) GNU Lesser General Public License;
- d) Плагин Taverna workbench.

65 Как называется расширения Chemistry Development Kit для информационного майнера Констанца (KNIME) и для Excel

- a) SMARTS;
- b) LICSS;
- c) Nightly;
- d) Java.

Тема 2. Организация работы в лаборатории в области информации

1. ACD / ChemSketch - ...

А) это химически интеллектуальный настольный инструментарий, созданный для того, чтобы помочь вам рисовать, редактировать, публиковать, отображать, импортировать и экспортировать ваши химические структуры, а также позволяет конвертировать различные химические и графические форматы файлов;

Б) это химически интеллектуальный интерфейс для рисования, который позволяет рисовать практически любую химическую структуру, включая органику, металлоорганические соединения, полимеры и структуры Маркуша;

В) это бесплатный, фантастически простой в использовании редактор молекул. Поскольку этот редактор является кроссплатформенным и позволяет использовать компьютерные ресурсы, вы можете запускать его тогда и там, где вам это нужно;

Г) это высокоэффективное и многофункциональное приложение, которое поможет вам создавать сложные химические документы или рисовать простые молекулы, которые можно использовать в ваших публикациях и проектах.

2. Пакет ACD/Labs Freeware состоит из какого количества автономных, но взаимосвязанных программ? Запишите названия ниже.

- А) 2;
- Б) 4;
- В) 1;
- Г) 3.

3. ChemSketch работает в двух режимах:

- А) Draw, text editor;
- Б) Structure, table processors;
- В) Text editor, animated graphics;
- Г) Structure, draw.

4. Как в ChemSketch называется кнопка для рисования цепи?

- А) Draw Normal;
- Б) Draw Chains;
- В) Draw Continuous;
- Г) Draw a Circle.

5. Установите соответствия между выполнением основных операций при нажатой кнопке Draw Normal:

А - Добавить связь в стандартном направлении	1 - щелкнуть по атому и, не отпуская клавишу мышки, передвинуть курсор в нужном направлении.
Б - Добавить связь в заданном направлении	2 - щелкнуть по связи
В - Нарисовать связь между имеющимися атомами	3 - щелкнуть по атому
Г - Изменить порядок связи	4 - щелкнуть по первому атому и, не отпуская клавишу мышки, тянуть связь ко второму атому

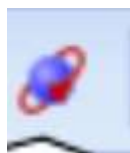
6. Что означает каждая из кнопок?



1



2



3



4

- А) Выделить и вращать в трехмерном пространстве;
 Б) Выделить/Переместить - для перемещения в плоскости листа атома, связи, всей структуры или ее фрагмента;
 В) Лассо для выделения;
 Г) Выделить/Вращать/Изменить размер - вращение выделенного фрагмента вокруг его центра в плоскости листа (центр будет отображен красным плюсом).

7. Полезные команды в меню. Раздел Tools. Выберите правильные ответы:

А) На экране можно показывать или скрывать те атомы водорода, которые насыщают свободные валентности (Explicit Hydrogens).

Б) Программа умеет генерировать систематическое название, R/S-стереодескрипторы, коды SMILES и InChI, а также генерировать структурные формулы по известным кодам SMILES и InChI.

В) Программа умеет рассчитывать физико-химические параметры вещества.

Г) Все ответы верные.

8. Как называется команда, которая позволяет скрыть атомы водорода:

А) Remove Explicit Hydrogens;

Б) Add Explicit Hydrogens;

В) Auto Renumbering;

Г) Calculate.

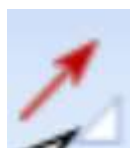
9. Что означает каждая из кнопок блока для написания уравнений химических реакций:



1



2



3



4

А) Знак "плюс";

Б) Калькулятор реагентов;

В) Стрелка между левой и правой частями уравнения;

Г) Для написания текста над стрелкой и под стрелкой.

10. Укажите правильную последовательность: если при отображении полимера необходимо указать концевую связь без атома, концевой атом заменяют "псевдо-атомом":

А) Щелкнуть по кнопке "Псевдо-атом";

Б) В левой колонке щелкнуть по треугольнику кнопки R — открывается список

В) Щелкнуть в структуре по концевым атомам углерода.

11. Для изменения положения атомов водорода, для изменения вида двойной связи следует при нажатой кнопке щелкнуть по группе СН_n или по связи. Какая кнопка является верной?



А



Б



В



Г

12. Вращение на 180° вокруг связи — при нажатой кнопке следует щелкнуть по соответствующей связи.



А



Б



В



Г

13. Что означает данная кнопка?



А) Вращение на 180° по осям x и y;

Б) «Полимер»;

В) Для разворота структуры в плоскости листа так, чтобы указанная связь оказалась горизонтальной или вертикальной;

Г) Для изменения положения атомов водорода.

14. Какой из параметров не появляется в окошке, при нажатии на кнопку «Полимер»?

А) Generate;

Б) Index;

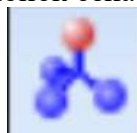
В) Connectivity;

Г) Style.

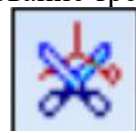
15. Какая из полезных кнопок означает генерирование трехмерной структуры?



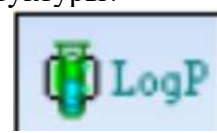
А



Б

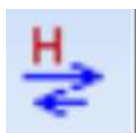


В



Г

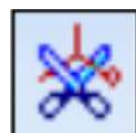
16. Какая из полезных кнопок означает генерирование устойчивых таутомерных форм?



А



Б

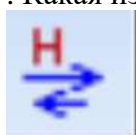


В



Г

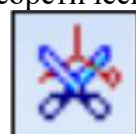
17. Какая из полезных кнопок означает расчет теоретического значения LogP?



А



Б

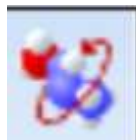


В



Г

18. Что означает данная кнопка?



19. В каком году была выпущена первая версия ACD/ChemDraw?

А) 2000 г.;

Б) 1997 г.;

В) 1993 г.;

Г) 1995 г.

20. Основной формат файлов в ACD / ChemSketch:

А) wav;

Б) bak;

В) html;

Г) sk2.

21. Что такое «JChemPaint»?
- А) многофункциональная программа для молекулярного 3D моделирования;
 - Б) это редактор и средство просмотра 2D-химических структур;
 - В) программа для построения калибровочных графиков;
 - Г) редактор виртуального химического синтеза.
22. В каких языках программирования он реализован?
- А) Python;
 - Б) C++;
 - В) Java;
 - Г) Arduino.
23. Какие модели структур можно воспроизвести в химическом редакторе?
- А) 2D;
 - Б) 3D;
 - В) Как 2D так и 3D.
24. В каком году был создан это редактор?
- А) 1997;
 - Б) 2000;
 - В) 2005;
 - Г) 2009.
25. На какой операционной системе поддерживается химический редактор?
- А) Windows;
 - Б) Linux;
 - В) UNIX;
 - Г) Apple;
 - Д) Программа кроссплатформенная.
26. Сколько версий у программы JChemPaint?
- А) 1;
 - Б) 2;
 - В) 3;
 - Г) 4;
27. JChemPaint, кроме визуального создания и редактирования структур, позволяет:
- А) определять химические реакции, задавая реагенты, продукты реакции и катализаторы;
 - Б) строить графики зависимости различных параметров;
 - В) рассчитать термодинамические характеристики;
 - Г) прогнозировать химические свойства.
28. Программой поддерживается?
- А) импорт структур в форматах SMILES и MDL;
 - Б) экспорт структур в форматах Chemical Markup Language и MDL;
 - В) импорт структур в формате SMILES и экспорт структур в формате MDL;
 - Г) и импорт, и экспорт структур в форматах SMILES, Chemical Markup Language и MDL.
29. Интерфейс приложения представляет собой:
- А) белый фон с функциональными окнами вызова оп периметру экрана;
 - Б) белый фон в клетку с функциональными окнами вызова справа экрана;
 - В) чёрный фон с функциональными окнами вызова с лева экрана;
 - Г) синий фон с функцией вызова с помощью мышки и клавиатуры.
30. В редакторе нет функций ...
- А) Отменить и Повторить;
 - Б) Увеличить и Уменьшить;
 - В) Сохранить как картинку;
 - Г) Переупорядочить структуры.

31. Слева по вертикали расположены функции:
- А) выбора из шаблонов;
 - Б) молекулярных связей;
 - В) вставки циклических связей;
 - Г) вставки элементов из таблицы.
32. Можно ли в редакторе повернуть молекулу в пространстве?
- А) да;
 - Б) нет;
 - В) в зависимости от молекулы.
33. В программе JChemPaint ...
- А) есть база шаблонов;
 - Б) нет базы шаблонов;
 - В) шаблоны нужно создавать самому и вносить в базу.
34. При рисовании в JChemPaint связей и атомов на вершинах автоматически размещаются атомы:
- А) водорода;
 - Б) углерода;
 - В) азота;
 - Г) кислорода.
35. Выберите правильный ответ для JChemPaint.
- А) для вставки другого элементов в углеродную связь нужно вызвать периодическую систему;
 - Б) для вставки другого элементов в углеродную связь нужно воспользоваться клавиатурой;
 - В) оба утверждения верны.
36. Для того, чтобы распечатать проделанную работу, нужно:
- А) сохранить как картинку и только после распечатать;
 - Б) сохранить в формате Word и после распечатать;
 - В) сохранить в новом приложении и после распечатать;
 - Г) на панели имеется функция печати бес посредних действий.
37. Среди циклических связей нет ...
- А) пентанового цикла;
 - Б) гексанового цикла;
 - В) гептанового цикла;
 - Г) октанового цикла;
38. В JChemPaint на каком языке функционирует редактор?
- А) на английском;
 - Б) на русском;
 - В) на латинском;
 - Г) на китайском.
39. Когда выпущена последняя версия программы?
- А) 2010;
 - Б) 2012;
 - В) 2014;
 - Г) 2016.
40. На каких условиях распространяется программа JChemPaint?
- А) с лицензией;
 - Б) без лицензии;
 - В) как с лицензией, так и без неё.
41. Основная цель AcidBaseLab:
- А) делать расчет кривой титрования;
 - Б) графически отображать структуру молекул;

создавать химические 3D модели;
отслеживать процесс химической реакции.

42. Титрование - ...

А) процесс определения концентрации исследуемого вещества путем добавления раствора титранта к раствору титруемого вещества по каплям;

Б) Добавление раствора анализируемого вещества к раствору известной концентрации;

В) Произвольное приливание стандартного раствора в присутствии индикатора до изменения окраски;

Г) Только произвольное добавление стандартного раствора в присутствии индикатора до изменения окраски.

43. Допишите предложение: Точка эквивалентности - ...

44. Укажите требования, которым должны удовлетворять реакции титрования: а) реакция должна быть стехиометрической, б) желательно возможно большая величина молярной массы эквивалента вещества. с) реакция должна протекать количественно (общий критерий – на 99,9 %), d) реакция должна протекать с достаточно высокой скоростью. е) вещества должны быть устойчивыми как при хранении в твердом виде, так и в растворе; f) должно быть вещество для фиксации конца титрования (индикатор).

А) Все;

Б) a, b, c, e, f;

В) a, b, d, e, f;

Г) a, c, d, f.

45. Вставьте пропущенное слово: Доля титрования - это отношение количества ..., израсходованного в определенный момент, к его количеству в точке эквивалентности.

46. Может ли водородный показатель быть:

А) Равным 0 1) да

Б) Равным 14

В) Равным > 14 2) нет

Г) Равным < 0

47. Чему равна концентрация водородных ионов $[H^+]$, моль/л, если:

А) $pH = 3$ а) 0

Б) $pH = 7$ б) 10^{-7}

В) $pH = 14$ в) 10^{-3}

г) 10^{-14}

48. Какой среде соответствует значение $pH = 9$

А) кислой;

Б) нейтральной;

В) щелочной.

49. Как изменится pH , если разбавить вдвое раствор $0,2 CH_3COOH$

А) Увеличится;

Б) Уменьшится;

В) Не изменится.

50. Вставьте пропущенное слово: экспериментально конец титрования устанавливают по изменению цвета ..., эта точка называется конечной точкой титрования

51. В точке эквивалентности доля равна:

А) 0;

Б) 1;

В) 2;

Г) -1;

52. Укажите неправильный вариант:

А) с AcidBaseLab возможно отслеживание изменение цвета раствора во время титрования

- Б) с AcidBaseLab можно выполнять любые pH расчёты
- В) AcidBaseLab может быть использована для моделирования реальных экспериментов титрования
- Г) с AcidBaseLab можно создавать химические 3D модели
53. Интервал изменения окраски индикатора зависит от ...
- А) концентрации индикатора
- Б) константы диссоциации индикатора
- В) значения pH титруемого раствора
- Г) интенсивности окраски индикатора
54. В титриметрическом анализе титрантом называется:
- А) исследуемый раствор;
- Б) рабочий раствор;
- В) любой раствор, используемый для анализа;
- Г) раствор индикатора.
55. Для определения точки эквивалентности в титриметрии используют:
- А) кривые титрования;
- Б) растворы индикаторов;
- В) зависимость скорости реакции от температуры;
- Г) зависимость скорости реакции от природы исходных веществ.
56. Кривые титрования показывают зависимость:
- А) скорости химической реакции между титрантом и исследуемым веществом от времени;
- Б) концентрации определяемого вещества от объёма добавленного титранта;
- В) какой-либо физической характеристики исследуемого раствора от объёма добавленного титранта;
- Г) концентрации исследуемого вещества от времени реакции.
57. Точка эквивалентности совпадает с точкой нейтральности ($pH = 7$) на ...
- А) кривой титрования;
- Б) при титровании слабой кислоты сильным основанием;
- В) при титровании сильной кислоты сильным основанием и, наоборот; всегда;
- Г) при титровании слабого основания сильной кислотой;
58. Точка эквивалентности лежит на кривой титрования при $pH > 7$ в случае:
- А) титрования сильной кислоты сильным основанием и, наоборот;
- Б) титрования слабого основания сильной кислотой;
- В) титрования слабой кислоты сильным основанием;
- Г) титрования слабого основания слабой кислотой.
59. Точка эквивалентности лежит на кривой титрования при $pH < 7$ в случае:
- А) титрования сильной кислоты сильным основанием и, наоборот;
- Б) титрования слабого основания сильной кислотой;
- В) титрования слабой кислоты сильным основанием;
- Г) титрования слабого основания слабой кислотой.
60. Выберите правильные характеристики для кривых титрования:
- А) скачок титрования не зависит от концентрации титруемого раствора и титранта;
- Б) вблизи точки эквивалентности наблюдается резкий скачок pH;
- В) для фиксирования точки эквивалентности при кислотно-основном титровании можно использовать любой индикатор, интервал перехода окраски которого лежит в пределах скачка pH на кривой титрования;
- Г) при титровании сильной кислоты сильным основанием можно использовать только те индикаторы, у которых $pH = 7$.
61. В каком году был первый выпуск программы Авогадро?
- А) 2016;

Б) 2008;

В) 2021;

Г) 2001;

62. На скольких языках доступна программа Авогадро?

А) 8;

Б) 2;

В) 16;

Г) 5;

63. Язык программирования Авогадро?

А). Python;

Б) Java в. Arduino;

В) C++, QT;

64. Для чего была создана программа Авогадро?

А) для средства проверки химических формул и структур;

Б) для расчета числа Авогадро;

В) для визуального наблюдения и редактирования молекулярных структур;

Г) редактор химической графики.

65. В верхней строке меню имеется команда:

А) Display Types;

Б) Stick;

В) Help;

Г) Element.

65. Число Авогадро равно:

А) $6 \cdot 10^{-23}$;

Б) $6 \cdot 10^{23}$;

В) $3 \cdot 10^{23}$;

Г) $-3 \cdot 10^{23}$.

67. Сопоставьте:

А) Закон Авогадро	Тепловой эффект химической реакции, проводимой в изобарно-изотермических/изохорно-изотермических условиях, зависит только от вида и состояния исходных веществ и продуктов реакции и не зависит от пути протекания
Б) Закон Генри	В равных объемах различных газов, взятых при одинаковых температурах и давлениях, содержится одно и то же количество молекул
В) Закон Грэма	Закон об относительной скорости истечения различных газов через пористую поверхность при одинаковых условиях
г. Закон Гесса	При постоянной температуре растворимость газа в данной жидкости прямо пропорционально давлению этого газа над раствором

68. В чем измеряется длина ребер?

А) радиан;

Б) мм;

В) ангстрем;

Г) Нанометр.

69. Как сделать анимацию (последовательность действий)?

А) auto rotation tool;

Б) extensions → molecular mechanics → setup force field;

В) click to measure;

Г) extensions → animation → loadfile → saveas.

70. Программа Авогадро НЕ обладает следующими инструментами:

А) инструменты для выравнивания;

Б) инструменты для визуализации;

В) обладает всеми перечисленными;

Г) не обладает никакими из перечисленных.

71. Что обозначает флажок «Show Angels» в инструменте установления центральной связи?

А) при вращении мышью плоскость меняется с желтой на синий;

Б) отображение углов выбранной связи ко всем соседним связям;

В) вращение фрагмента в нужном положении;

Г) автоматически вычисляется расстояния между атомами в соответствующем порядке.

72. Для того чтобы спроектировать нанотрубку, нужно найти в меню:

А) «View»;

Б) «Sequence»;

В) «Build»;

Г) «Crystallography».

73. Выберите язык программирования XDrawChem

А) C++;

Б) Java;

В) Python;

Г) C#.

74. XDrawChem является:

А) приложением 3D-моделирования;

Б) двумерной молекулярной графической программой;

В) химический калькулятор реакций;

Г) программа моделирования сложных параллельно-последовательных реакций.

75. Что не определяет программа XDrawChem?

А) рKa;

Б) коэффициент распределения октанол-вода;

В) изменение энтальпии газовой фазы;

Г) s,p,d,f – орбитали для атомов.

76. Программа XDrawChem информацию о составе и структуре молекул веществ не позволяет:

А) видеовоспроизводить;

Б) вводить;

В) редактировать;

Г) выводить на внешние носители.

77. Программа XDrawChem имеет аналог для MAC OS, как он называется:

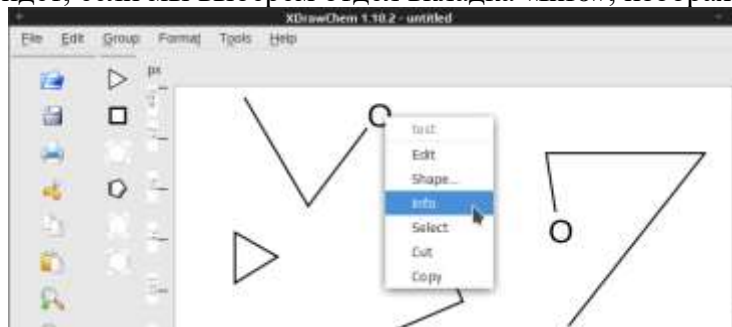
А) JChemPaint;

Б) WinDrawChem;

В) ChemDraw;

Г) Jmol.

78. Что произойдет, если мы выберем отдел вкладка «Info», изображенный на рис?



А) Получим информацию о составе и структуре молекул веществ;

Б) Выведем все стандартные аминокислоты и нуклеиновые кислоты из встроенной библиотеки;

В) Извлечем структуры из сетевой базы данных;

- Г) Выравниваем фигуру молекулы.
79. Каким образом не осуществляется поиск вещества в программе XDrawChem?
- А) По названию вещества;
Б) По брутто-формуле;
В) По CAS PN и иным регистрационным номерам;
Г) По LnChIKey.

80. XDrawChem не поддерживает работу с форматами ...

- А) CDX, CDXML и CHM;
Б) XML;
В) PNG, BMP, EPS и SVG;
Г) AVI, MPG.

81. XDrawChem с помощью внешних приложений может ...

- А) генерировать трёхмерные молекулярные модели;
Б) видеопроигрывать процесс реакции или синтеза;
В) визуализировать орбитали;
Г) моделировать газодинамику процесса.

82. Какую функцию выполняет данная вкладка меню «set background color»



- А) перемещение панели инструментов;
Б) отключение панели инструментов;
В) редактирование химических структур;
Г) инструмент для отрисовки фона.

83. Выберите функции программы XDrawChem.

- А) Автоматическое выравнивание фигур;
Б) Обнаружение структур, текста и стрелок, а также их автоматическое размещение;
В) Генерирование трёхмерных молекулярных моделей;
Г) Извлечение структур из сетевой базы данных;
Д) Визуализирование орбиталей атомов;
Е) Извлечение информации о молекуле.

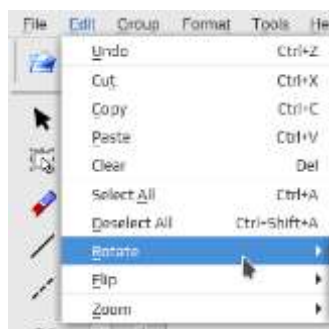
84. Год создания программы XDrawChem:

- А) 2011;
Б) 2002;
В) 2005;
Г) 2007.

85. Какой из перечисленных форматов для сохранения в программе XDrawChem является её собственным форматом?

- А) *.cml;
Б) *.cif;
В) *.mol;
Г) *.xdc;
Д) *.ent;
Е) *.vis.

86. Какую функцию выполняет данная вкладка меню «Rotate»



- А) Расположение молекулы с учетом длины и углов связи;
- Б) Построение 3D-изображения;
- В) Моделирование геометрических параметров молекулы;
- Г) Интерактивная визуализация молекул.

87. Выберите правильное описание логотипа программы XDrawChem

- А) Зеленый фон с изображением серых букв XDC и карандаша;
- Б) Серый фон с изображением карандаша и структуры молекулы;
- В) Синий фон с изображением букв XDC и структуры молекулы;
- Г) Серый фон с изображением букв XDC.

88. Дополните определение. XDrawChem - ... приложение для отрисовки и ... химических структур.

89. Дополните определение. Молекулярный редактор - специализированное приложение, позволяющее ..., ... и ... на внешние носители информацию о составе и структуре молекул веществ.

90. Дополните определение. Информационные технологии в химии могут применяться в виде ... (например, спектрофотометры) и ... (электронные ресурсы, программы)

91. Проведите соответствие между программой и ее функцией

- | | |
|-------------|--|
| 1 XDrawChem | А) программа для просмотра структуры молекул в трех измерениях; |
| 2 Jmol | Б) создание и редактирование химических структур и оборудования; |
| 3 Avogadro | В) графический молекулярный редактор; |
| 4 ACD | Г) визуализатор для молекулярного моделирования. |

Тема 3. Программные и информационные систем в области химии

1. Какие основные задачи помогает решать программа Orbital Viewer:

- А. Построение сложных молекул, химических формул;
- Б. Предсказывание спектра вещества, используя данные о структуре, и визуализировать объемные модели молекул и орбиталей с помощью модуля MOPAC;
- В. Программа для расчета и визуализации атомных и молекулярных электронных орбиталей;
- Г. Создание 3D-моделей молекул, построение структур любого органического соединения.

2. Как отображаются орбитали в программе Orbital Viewer:

- Д. Орбитали могут отображаться в виде точек, каркасной модели и поверхностей;
- Е. Орбитали могут отображаться в виде точек, поверхностей и математической модели;
- Ж. Орбитали могут отображаться в виде каркасной модели и поверхности;
- З. Орбитали могут отображаться в виде точек.

3. Какие возможности по управлению изображениями предоставляет программа Orbital Viewer:

- А. Пользователь не может управлять изображением;
- Б. Пользователь может управлять изображением;

В. Пользователь может управлять изображением, в том числе, возможно получение изображения в стереорежиме. А также графическое редактирование изображения с помощью графических инструментов;

Г. Пользователь может управлять изображением, в том числе, возможно получение изображения в стереорежиме.

4. Какие операционные системы поддерживают программу?

- А. Windows Vista, XP, 2000;
- Б. Windows XP, Vista, 7, 8, 8.1 и 10;
- В. Linux;
- Г. POSIX.

5. Какие орбитали позволяет смотреть программа?

- А. s, p, d, f;
- Б. s, p;
- В. s;
- Г. s, p, d.

6. Какие форматы файлов поддерживает программа?

- А. TIFF, PPM, BMP, AVI и VRML;
- Б. mono, mpc, mrw, MTV, mvg, nef, ofr, otb;
- В. pfm, pgm, picon, pict, pix, png, pnm, ppm;
- Г. epdf, html, pdf, shtml, doc, docx, xls, xlsx, pptx.

7. Во вторичном меню вы можете выбрать следующие варианты:

- А. тип орбитали вы, который хотите начертить (s, p, d и т. д.);
- Б. главное квантовое число для орбитали;
- В. m_l – снова вы можете сделать любой правильный или неправильный выбор;
- Г. тип атома (число протонов и массы ядра).

Ответ: 1. А, Г 2. Б, В 3. А, Б, В 4. А, Б, В, Г.

8. Поверхность, которую вы получили при построении молекулы – поверхность, на которой ...имеет заданное вами значение. Ее вид зависит от метода визуализации, который вы используете.

- А. Волновой функции;
- Б. Квадрат волновой функции;
- В. Интегральной функции;
- Г. Квадрат интегральной функции.

9. С помощью Orbital Viewer вы можете изобразить:

- А. Одну орбиталь;
- Б. Две орбитали;
- В. Три орбитали;
- Г. Несколько орбиталей;

10. Изображение более чем одной орбитали вы можете сделать путем ... (в правом верхнем углу меню):

- А. Добавления атомов;
- Б. Добавления орбиталей;
- В. Добавлением молекул;
- Г. Добавлением ионов.

11. Изображение более чем одной орбитали вы можете сделать путем добавления атомов (в правом верхнем углу меню); вы можете:

А. использовать X, Y и Z координаты для размещения различных атомов на экране;

Б. использовать X, Y и Z координаты для размещения различных атомов на экране – в плоскости экрана находится плоскость XZ;

В. использовать X, Y и Z координаты для размещения различных орбиталей на экране – в плоскости экрана находится плоскость XY;

Г. использовать X, Y и Z координаты для размещения различных атомов на экране – в плоскости экрана находится плоскость XY;

12. Для выбора главного квантового числа в Orbital Viewer для орбитали верны следующие суждения:

- А. Важно знать правила сочетания квантовых чисел n и l ;
- Б. Задать правильное значение протонов в ядре;
- В. В случае неверного задания квантовых чисел программа его сбросит;
- Г. Учесть валентность элемента.

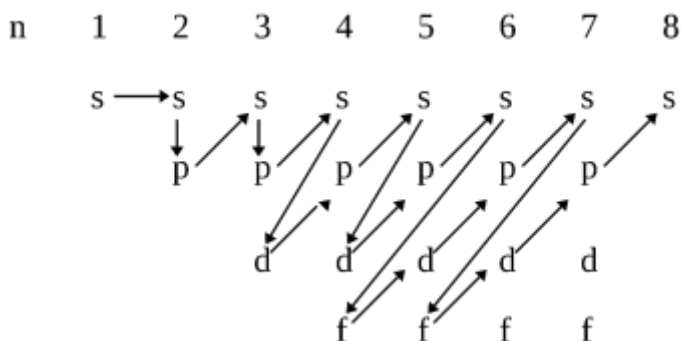
Выберите верный ответ: 1. А, В, Г; 2. Б, Г; 3. А, В; 4. А, Б, В, Г.

13. Варианты меню Orbital Viewer позволяют:

- А. изменять цвета фона и орбиталей;
- Б. вращать орбитали, удерживая левую кнопку мыши вниз, и изменять, их размер, удерживая правую кнопку мыши;
- В. изменять прозрачность изображения, добавлять узловые плоскости и поверхности орбитального участка;
- Г. Внутренние узловые структуры можно показать путем построения разреза орбитали (красная частичная сфера в меню);
- Д. Можно увеличить размер орбиты по размеру экрана.

Выберите верный ответ: 1. А, Б, В, Г, Д; 2. А, В, Г; 3. А, Б, В; 4. Б, Г, Д.

14. Приведённую в схеме очередность заполнения электронами атомных орбиталей подчиняется правилу



15. При заполнении орбитальных оболочек атома более предпочтительны (более энергетически выгодны), и, значит, заполняются раньше те состояния, для которых сумма главного квантового числа и побочного (орбитального) квантового числа, то есть, имеет

- А. Меньшее значение;
- Б. Больше значение;
- В. Равное значение;
- Г. Равный потенциал.

16. Правило сумм двух первых квантовых чисел, иногда называемого правилом $(n+l)$, разработанно в 1951-м году

- А. У.Ф. Джиоком;
- Б. В. М. Клечковским;
- В. А.Б. Нобелем;
- Г. Д.И. Менделеев.

17. Атомы объединяются в молекулы благодаря химическим связям. Причем участвуют в образовании этих связей электроны, находящиеся в ... слое этих атомов.






18. Существует несколько теорий, описывающих процесс связывания атомов:

- А. Теория резонанса и теория валентных связей;
- Б. Теория валентных связей и теория молекулярных орбиталей;
- В. Теория валентных связей и теория атомных орбиталей;
- Г. Теория изогнутой химической связи и теория молекулярных орбиталей.





19. В теории молекулярных орбиталей:
А. Молекула рассматривается как совокупность сохранивших индивидуальность атомов;
Б. Атом рассматривается как целое;
В. Молекула рассматривается как целое, а не как совокупность сохранивших индивидуальность атомов;
Г. Ионы рассматривается как целое, а не как совокупность сохранивших индивидуальность атомов.
20. В каком году была выпущена последняя версия VKChem?
А. 2012;
Б. 2021;
В. 2010;
Г. 2015;
21. VKChem – бесплатный химический редактор от разработчика 1-..., в настоящее время поддерживаемый 2-....
А. Beda Kosata;
Б. Danny Devito;
В. Billy Herrington;
Г. Reinis Danne.
22. Какую платформу не поддерживает VKChem:
А. Windows;
Б. Linux;
В. MacOS;
Г. Android.
23. Функции VKChem:
А. 2D-моделирование молекул;
Б. 3D-моделирование молекул;
С. Изменение угла молекулы;
D. Название по ИЮПАК на основе структуры соединения;
E. Все перечисленное.
- Выберите верный ответ:
А. А, В, С;
Б. В, С, D;
В. А, С;
Г. E.
24. Что не относится к достоинствам программы VKChem:
А. Малый размер и системные требования;
Б. Минималистичный интерфейс, который отличает от других программ подобного рода;
В. Поддержка на многих платформах;
Г. Углубленные функции для моделирования процессов.
25. Недостатки программы VKChem:
А. Минималистичный интерфейс;
Б. Ограниченный набор функций;
В. Платная подписка;
Г. Не поддерживается на MacOS.
26. На каком языке программирования разработана VKChem
А. C#;
Б. Python;
В. Rust;
Г. JavaScript.
27. Какой подход использовался при создании интерфейса VKChem:

- А. Скевоморфизм;
 - Б. Material design;
 - В. Минимализм;
 - Г. Неоморфизм.
28. К какому виду графических редакторов относится VKChem:
- А. Гибридные;
 - Б. Векторные;
 - В. Растровые;
 - Г. Профессиональные.
29. С помощью VKChem рисовать схемы соединений очень легко, благодаря рисованию ..., а также ограничениям их протяженности и углу наклона.
30. Какая простая векторная графика поддерживается?
31. Что можно настраивать в VKChem:
- А. Шрифт и цвет;
 - Б. Заголовок;
 - В. Отступы;
 - Г. Разметку страницы.
32. Модель какого соединения есть в панели инструментов VKChem:
- А. Пурин+;
 - Б. Анилин;
 - В. Бензойная кислота;
 - Г. Фенол.
33. VKChem поддерживает:
- А. 2D и 3D вращение+;
 - Б. Возможность поделиться результатом в соц. сетях;
 - В. Голосового помощника на английском языке;
 - Г. Голосового помощника на русском языке.
34. Какой формат не поддерживается для экспорта в VKChem:
- А. PDF;
 - Б. Draw;
 - В. Molfile;
 - Г. APK.
35. Протяженность и угол наклона ограничены:
- А. Никогда;
 - Б. Всегда+;
 - В. Ограничены при большом количестве атомов;
 - Г. Ограничены при малом количестве атомов.
36. Когда состоялся релиз программы VKChem:
- А. 2010;
 - Б. 2011;
 - В. 2009+;
 - Г. 2016;
37. В каком формате не поддерживается импорт в VKChem:
- А. Molfile;
 - Б. SMILES;
 - В. InChI;
 - Г. Draw+;
38. Поддерживается ли проверка достоверности нарисованных соединений?
- А. Да+;
 - Б. Нет;
 - В. По покупке полной версии;
 - Г. Если эта модель была добавлена другим пользователем ранее.

39. Кому подойдет программа VKChem:
- Пользователям с мощным ПК;
 - Опытным инженерам;
 - Студентам, ведущим научную деятельность;
 - Неопытным студентам+.
40. ChemDraw – ...
41. В состав какого пакета входит ChemDraw:
- ACD/ChemSketch;
 - VKchem;
 - ChemOffice;
 - JChemPaint.
42. В ... году впервые был разработан ChemDraw.
43. Выберите правильные ответы: Возможности ChemDraw:
- Создание и редактирование химических структур и оборудования;
 - Невозможна конвертация названия соединения в структуру и обратное название соединения по структуре (ИЮПАК);
 - Симуляция ЯМР-спектров;
 - Средства для проверки химических формул и структур;
 - Плохая база шаблонов распространенных макроструктур и оборудования.
44. Собственными форматами файлов для ChemDraw являются:
- CDX, CDXML;
 - CDXML, CHM;
 - CDX, CHM;
 - CDX, CDXML, CHM.
45. Установите соответствие между элементами контрольной панели и их расшифровкой:

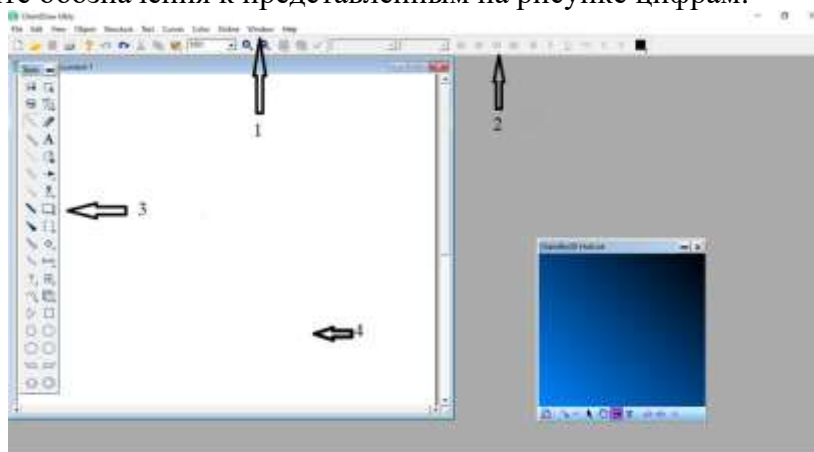
Элемент контрольной панели	Расшифровка
1. 	А. Позволяет нарисовать особые химические символы (заряды ионов, значки радикалов и прочее);
2. 	Б. Позволяет нарисовать различные электронные орбитали;
3. 	В. Отображает соответствие реакционных центров молекул. Поддерживаются только одностадийные реакции;
4. 	Г. Создает цепь с указанным числом звеньев;
5. 	Д. Включает режим рисования векторной графики. Сглаженной ломаной линии.

46. Какой версией программы ChemDraw используют как химики, так и биохимики:
- Ultra;
 - Pro;
 - Std;
 - Все перечисленные.
47. В ChemDraw реализована возможность генерирования названия молекулярной структуры в соответствии с правилами.....
48. Установить соответствие между элементами главного меню и их расшифровкой
- | Элемент главного меню | Расшифровка |
|-----------------------|-------------|
|-----------------------|-------------|

1. 
2. 
3. 
4. 

- А. Проверка выделенной молекулярной структуры на наличие ошибок;
- Б. Проверка соответствия молекул обычным длинам связей и углам;
- В. Подстрочный и надстрочный текст;
- Г. Запись в режиме “формулы” (автоматическая подстановка регистра под цифры (буквы)).

49. Напишите обозначения к представленным на рисунке цифрам:

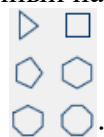


50. Через какую кнопку доступна функция проверки на наличие ошибок?

51. С помощью чего осуществляется процесс рисования большинства молекулярных структур?

- А. Главной панели;
- Б. Контрольной панели;
- В. Главного меню;
- Г. Ничего из перечисленного.

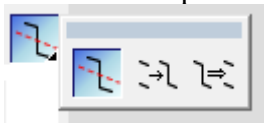
52. Что означает элемент, представленный на рисунке?




- А. Предназначены для добавления связей (названия приведены не по химическому типу, а по виду отображения);
- Б. Создает цепь с указанным числом звеньев;
- В. Серия кнопок позволяет быстро добавить в вашу работу различные кольца циклоалканов и ароматические кольца;
- Г. Запись в режиме “формулы” (автоматическая подстановка регистра под цифры (буквы)).

53. Обратный процесс генерирования названия структуры ...

54. Что можно узнать, нарисовав конкретную молекулу и, выделив ее с помощью одной из трех кнопок контрольной панели, затем, нажав кнопку View главного меню?



55.  – это

56. Для того чтобы в требуемой схеме указать буквы греческого алфавита (α , β , γ и т. д.), единицы измерения длины связей \AA , температурные условия протекания реакции в градусах и т. п., можно воспользоваться панелью.....

57. Реакционный центр – ...

58. Наиболее важная часть реакции – ...

59. Где содержатся средства для редактирования текста, изменения шрифта, размера и цвета шрифта, выравнивания текста:

- А. Главной панели;
- Б. Контрольной панели;
- В. Главного меню;
- Г. Ничего из перечисленного.

Тема 4. Компьютер в химической лаборатории

1. Какое предназначение у программы Mercury?

А) изучение строения химических элементов;

Б) является онлайн-журналом, в котором содержится кристаллографическая информация;

В) это один из авторитетнейших онлайн-источников термодинамической, спектроскопической и структурной информации;

Г) специализированная программа визуализации кристаллографической информации.

2. Какое действие надо сделать, чтобы вернуть исходный вид структуры?

А) «Packing»;

Б) «Reset»;

В) Просто «выход» (нажать один раз);

Г) «More Info».

3. Может ли данная программа генерировать рентгенограммы?

А) Да, щёлкнув по кнопке «Powder»;

Б) Да, щёлкнув по кнопке «Packing»;

В) Нет, такой функции не предусмотрено;

Г) Нет, данная программа только определяет структуру параметров химических веществ в кристаллическом состоянии.

4. Какое действие даёт кнопка «>>» и где она расположена?

А) На верхней панели. Удаление измеренных геометрических параметров с экрана;

Б) На нижней панели. Вход для начала измерения;

В) На нижней панели. Вход к получению таблиц с числовыми значениями структурных параметров;

Г) На нижней панели. Удаление измеренных геометрических параметров с экрана.

5. Что означает голубой цвет пунктира в отображении модели молекулы?

А) Если отображён только один атом средней молекулы;

Б) Если отображение является нечётким;

В) Голубой пунктир информирует о том, что структуру стоит развернуть в наиболее удобное положение и приблизить ее к зрителю;

Г) Если соседняя молекула отображена целиком.

6. Что означает красный цвет пунктира?

А) Может быть определено межъядерное расстояние;

Б) Может быть построен угол между двумя атомами;

В) Построена только часть молекулы;

Г) Отображен только один атом соседней молекулы.

7. Что нужно сделать, чтобы измерить двугранный (торсионный) угол?

А) Щёлкните поочередно по трем атомам;

Б) Щёлкните поочередно по двум атомам;

В) Щёлкните поочередно по четырём атомам;

Г) Щёлкните по одному атому.

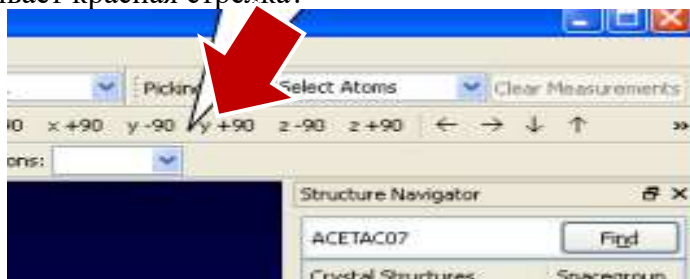
8. Что нужно сделать, чтобы измерить длину связи?

А) щёлкнуть по двум связанным атомам;

Б) Щёлкните поочередно по четырём атомам;

В) Указать химические символы и номера атомов;

- Г) Указать только номера атомов.
9. Можно ли измерить расстояние и между несвязанными атомами?
- А) Нет, так как не будет пунктирных линий;
- Б) Нет, так как для программы нужны хотя бы два связанных атома;
- В) Нет, так как для программы нужны только связанные атомы;
- Г) Программа может измерить расстояние и между несвязанными атомами.
10. Где находится кнопка «Clear Measurements» и какое действие означает?
- А) Команда в контекстном меню. Снять выделение атома;
- Б) команда в контекстном меню и кнопка на верхней панели. Удаление измеренных геометрических параметров с экрана
- В) Кнопка на верхней панели. Снять выделение атома;
- Г) Кнопка нижней панели и в контекстном меню. Команда выделить атом.
11. Как выбрать тип модели?
- А) «Style» - «Ball and Stick»;
- Б) «Style» - «Measure Angles»;
- В) «Style» - «Clear Measurements»;
- Г) «Display» - «Ball and Stick».
12. Что нужно сделать, чтобы измерить валентный угол?
- А) Щёлкните поочередно по трем атомам;
- Б) Щёлкните поочередно по двум атомам;
- В) Щёлкните поочередно по четырем атомам;
- Г) Щёлкните по одному атому.
13. В каких файлах хранится кристаллографическая информация?
- А) doc;
- Б) CIF-файл;
- В) xlsx;
- Г) архивный файл «rar».
14. На что указывает красная стрелка?



- А) Тип модели;
- Б) Параметры структуры;
- В) Оси элементарной ячейки;
- Г) Управляемое вращение.
15. Что обозначает действие «Show cel axes»?
- А) Тип модели;
- Б) Параметры структуры;
- В) Оси элементарной ячейки;
- Г) Управляемое вращение.
16. Что означают пунктирные линии?
- А) близко расположенные атомы соседних молекул;
- Б) молекула отображена целиком;
- В) Наличие атомных связей;
- Г) Отсутствие атомных связей.
17. Длина водородной связи это ...
- А) 1,897 А;
- Б) 0,821 А;

В) 0,867 А;

Г) 1,799 А;

18. Что делать, чтобы происходило вращение в трёхмерном пространстве?

А) при нажатой клавише Ctrl и удерживая левую клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигайте курсор в нужном направлении;

Б) удерживая правую клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигайте курсор по вертикали;

В) при нажатой клавише Shift и удерживая левую клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигайте курсор по горизонтали;

Г) удерживая левую клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигайте курсор по горизонтали и по вертикали.

19. Что делать, чтобы происходило вращение в плоскости экрана?

А) при нажатой клавише Ctrl и удерживая левую клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигайте курсор в нужном направлении;

Б) удерживая правую клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигайте курсор по вертикали;

В) при нажатой клавише Shift и удерживая левую клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигайте курсор по горизонтали;

Г) удерживая левую клавишу мышки в нажатом состоянии, передвигайте курсор по горизонтали и по вертикали.

20. «View → Toolbars → Structure Navigator» Что будет, если указать это в меню?

А) Ничего не произойдёт;

Б) Отобразятся отдельные знаки;

В) Отобразится правая панель;

Г) Отобразится вся панель;

21. Заполните пропуски. ChemLab - ..., которое ...

22. Набор стандартных лабораторных методик включает:

а) титрование, горячая/холодная водяные бани, измерение температуры, измерение объёма, измерение веса, измерение pH;

б) лабораторные нагревательные бани, декантирование;

в) измерение электропроводности, измерение напряжения;

Варианты ответов:

А) Верно только а);

Б) Верно а) и в);

В) Верно а) и б);

Г) Верно а), б) и в).

23. В ChemLab встроено моделирование экспериментов по:

А) по фракционной кристаллизации;

Б) по стехиометрии;

В) по ядерной химии;

Г) по кинетике.

24. Графика, представленная в программе ChemLab:

А) 2d;

Б) 3d;

В) 2,5d;

Г) 1d;

25. Установите соответствие:

Химики-информатики:

1. С. Трепалин

2. Ю. Черешник

3. А. Алексеенко

Вклад в развитие программы:

А) создал ChemD;

Б) создал электронный учебник по работе с программой на русском языке;

В) сделал качественный перевод рекомендаций

по выполнению лабораторных работ;

26. Программа ChemLab была создана в:

- а) 1996 г.;
- б) 2005 г.;
- в) 1962 г.;
- г) 2020 г.

27. Управление программой ChemLab осуществляется:

- А) выбором команд из главного меню;
- Б) с помощью гиперссылок;
- В) выбором команд из главного меню и с помощью гиперссылок;
- Г) нет верного варианта ответа.

28. Для титрования в программе ChemLab возможно:

- А) построение кривой титрования;
- Б) выполнение расчётов в программе;
- В) трёхмерная симуляция взаимодействия молекул окислителя и восстановителя;
- Г) нет верного варианта ответа.

29. Какие справочные материалы присутствуют в программе ChemLab?

- А) таблица Менделеева;
- Б) таблица растворимости;
- В) таблица квадратов двухзначных чисел;
- Г) таблица степеней окисления.

30. В программе ChemLab есть раздел с видеофильмами:

- А) с историей создания ChemLab;
- Б) с курсом лекций по окислительно-восстановительному титрованию;
- В) демонстрационных опытов;
- Г) по построению кривых титрования.

31. Продолжите предложение. Для слива опасных отходов в программе предусмотрен:

32. Продолжите предложение. Главное окно программы содержит ... меню и ... для записи.

33. Что в ChemLab позволяет выполнять различные рабочие операции в одном рабочем поле?

- А) многооконность;
- Б) многозадачность;
- В) блоковая структура;
- Г) многопоточность.

34. Выберите неправильный ответ. Какие ресурсы содержит в себе каждый программный блок?

- А) список реактивов;
- Б) список индикаторов;
- В) список формул для расчетов;
- Г) список возможных операций для выполнения определенного эксперимента.

35. Как добавить в работу новый блок в ChemLab?

- А) комбинацией клавиш Shift+O;
- Б) командой "add_new" в программной консоли ChemLab;
- В) комбинацией клавиш L Ctrl+B;
- Г) простым копирование в рабочую область.

36. Установите соответствие:

<u>Команда:</u>	<u>Выполняемое действие:</u>
А) Introduction;	1) Отчет о наблюдении;
Б) Procedure;	2) Введение к работе;
в) Observation;	3) Порядок выполнения работы.

37. При запуске ChemLab создается новый файл и открывается диалоговое окно:
А) Introduction;
Б) Lab Models;
В) Procedure;
Г) Work Mode.
38. В ChemLab какой из разделов представляет собой список стандартных моделей некоторых химических систем вместе с кратким описанием каждой?
А) Introduction;
б) Lab Models;
В) Procedure;
Г) Work Mode.
39. Команда "Add test tube" добавляет в рабочую область:
А) пробирку;
Б) бюретку;
В) мерный цилиндр;
Г) тестовый стенд.
40. Выберите неправильный ответ. ПО ChemLab работает на следующих платформах:
А) MacOS;
Б) Windows;
В) Linux;
Г) iOS.
41. Метод ЯМР - ...
А) используют для анализа веществ, атомы которых имеют ядра с нечётным количеством протонов;
Б) основан на взаимодействии ядер атомов с постоянным магнитным полем;
В) позволяет измерять оптическую активность веществ;
Г) основан на анализе спектров люминесценции веществ в процессе ЯМР.
42. Переход с нижнего энергетического уровня на верхний сопровождается
А) выделением энергии;
Б) поглощением энергии;
в) наличием электронов;
Г) наличием протонов.
43. Химический сдвиг δ тем больше, чем
А) слабее смещена электронная плотность атома водорода;
Б) сильнее смещена электронная плотность атома углерода;
В) не зависит от электронной плотности атома водорода;
Г) сильнее смещена электронная плотность с атома водорода.
44. Compound Name - ...
А) название композита;
Б) название спектра;
В) название вещества;
Г) название пика.
45. Приведенные значки в программе NMR Spectrum на панели означают



- А) ориентация листа;
Б) вращение формулы вокруг оси;
В) пространственное изображение формулы;
Г) поворот формулы вправо и влево, вверх и вниз.
46. Приведенные значки в программе NMR Spectrum на панели означают



- А) стехиометрическое положение фрагмента сверху;
- Б) стехиометрическое положение фрагмента снизу;
- В) химическая связь;
- Г) валентность.

47. Спектральные методы анализа - ...

А) основаны на измерении интенсивности электромагнитного излучения, которое поглощается или испускается анализируемым веществом;

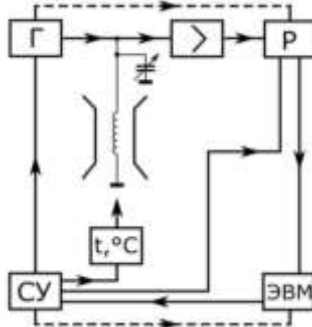
Б) основаны на измерении поглощения веществом электромагнитного излучения в видимой и ближней ультрафиолетовой области спектра;

В) основаны на исследовании спектров отражения веществ;

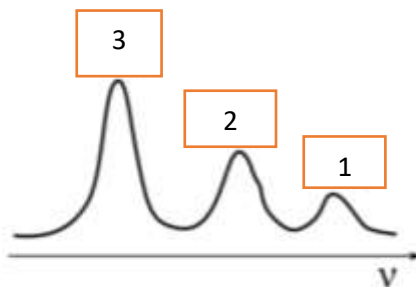
Г) основаны на изучении взаимодействия веществ с электромагнитным излучением.

48. Магнитный момент ядра (μ) связан с собственным моментом количества движения (p) соотношением $\mu = \gamma p = \gamma \hbar I$. Расшифруйте составляющие формулы.

49. Опишите схему прибора для наблюдения ЯМР



50. Соотнесите на спектре ядер ^1H этилового спирта (относительно низкое разрешение) фрагменты CH_3 , CH_2 , OH



1	CH_3
2	CH_2
3	OH

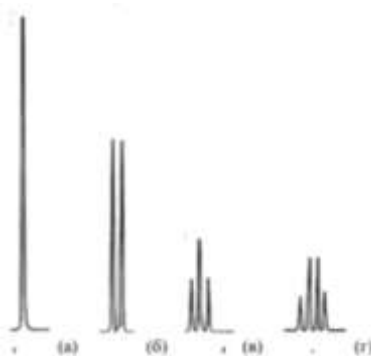
51. Из ядер атомов, наиболее часто встречающихся в органических соединениях, магнитным моментом обладают изотопы:

- А) ^1H ;
- Б) ^{13}C ;
- В) ^{19}F ;
- Г) ^{31}P .

52. Основными характеристиками спектров ЯМР являются:

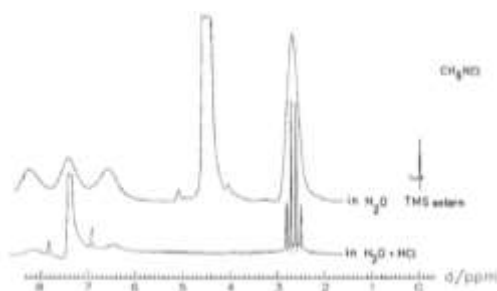
- А) химический сдвиг;
- Б) мультиплетность;
- В) константа спин - спинового взаимодействия;
- Г) площадь сигнала резонанса.

53. Обозначьте название и обозначение сигналов ЯМР спектра, приведенных на картинке

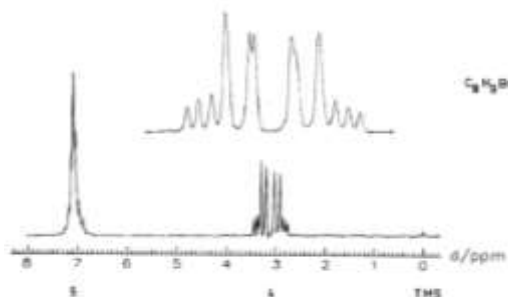


54. Напишите общие правила для интерпретации спектров ^{13}C

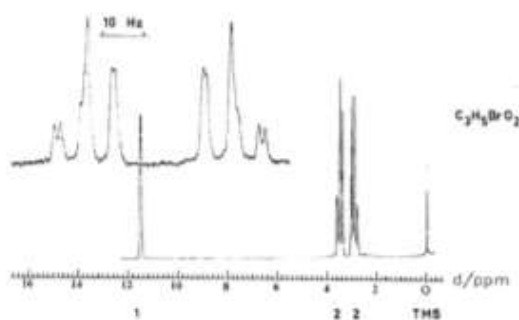
55. Определите строение молекулы соединения по заданной брутто-формуле и спектру ^1H ЯМР. Спектры сняты на приборе с рабочей частотой 60 МГц в растворе в CCl_4 .



56. Определите строение молекулы соединения по заданной брутто-формуле и спектру ^1H ЯМР. Спектры сняты на приборе с рабочей частотой 60 МГц в растворе в CCl_4 .



57. Определите строение молекулы соединения по заданной брутто-формуле и спектру ^1H ЯМР. Спектры сняты на приборе с рабочей частотой 60 МГц в растворе в CCl_4 .



Шкала оценивания: пятибалльная.

Критерии оценивания: Каждый вопрос (задание) в тестовой форме оценивается по дихотомической шкале: выполнено – 1 балл, не выполнено – 0 баллов.

Применяется следующая шкала перевода баллов в оценку по 5-балльной шкале:

- 5 баллов соответствуют оценке «отлично»;
- 4 балла – оценке «хорошо»;
- 3 балла – оценке «удовлетворительно»;
- 2 балла и менее – оценке «неудовлетворительно».

1.2 ТЕМЫ РЕФЕРАТОВ

- 1 Информация: история и перспективы.
- 2 Науковедение, наукометрия, информатика.
- 3 Отечественные и зарубежные источники информации по химии.
- 4 Совершенствование средств распространения, хранения, представления и обработки информации с развитием научно-технического прогресса.
- 5 Типы аудио-, видеосредств и методология их применения.
- 6 Современная компьютерная техника: структура, архитектура, основные характеристики.
- 7 Понятие о мультимедиа. Основные возможности. Главные области использования.
- 8 Способы распространения химической информации. Химическая информация, распространяемая через Internet.
- 9 Коммерческие источники информации. Бесплатные источники информации.
- 10 Публикации.
- 11 Электронные конференции. Химические сайты и форумы.
- 12 Домашние страницы учебных заведений и государственных учреждений, занимающихся сбором, обработкой и хранением информации.
- 13 Химические новости. Банки данных.
- 14 Необходимая информация для проведения работ в лаборатории и её сбор.
- 15 Поиск и выбор подходящих методик с учетом доступности и свойств реагентов.
- 16 Подбор оборудования и реактивов для исследований.
- 17 Производители химического оборудования и реактивов, посредники и связь с ними.
- 18 Заказ оборудования через Internet.
- 19 Историческая справка. Развитие компьютерной техники и ее применение в обучении.
- 20 Обучающая среда. Система преподаватель - студент.
- 21 Компьютер, как средство обучения и восприятия.
- 22 Роль преподавателя в процессе обучения с использованием компьютеров.
- 23 Характеристики современных компьютеров, используемых в образовании. Тенденции и перспективы развития. Взаимодействие с пользователем.
- 24 Компьютерное моделирование в химии (органическая химия, неорганическая химия, физико-химические методы исследования, квантовая химия, физическая химия).
- 25 Применение различных пакетов прикладных программ.
- 26 Компьютерное планирование органического синтеза (КПОС).
- 27 Основные операции КПОС. Представление молекул.
- 28 Компьютерное представление реакций.
- 29 Ретросинтетический и синтетический подходы.
- 30 Выбор пути синтеза в условиях КПОС.
- 31 Стратегия и тактика. Дальнейшее развитие КПОС.
- 32 Кинетика. Обработка кинетических данных.
- 33 Моделирование в кинетике. Моделирование в химической технологии.
- 34 Применение компьютеров в кристаллографии. Принципы и методы кристаллографии.
- 35 Комплексы программ, применяемых в рентгеноструктурном анализе.
- 36 Стыковка компьютеров с внешними устройствами.

- 37 Примеры использования систем компьютер-денситометр. Преобразование данных.
- 38 Основные характеристики и возможности приборов, оснащенных компьютерами.
- 39 Перспективы развития компьютеров в химической лаборатории
- 40 Современные информационные технологии. Основные понятия информационных технологий.
- 41 Основные этапы развития информационных технологий. Роль информационных технологий в развитии общества
- 42 Классификация информационных технологий; Аппаратное обеспечение современных информационных технологий.
- 43 Предметно – ориентируемые аналитические системы. Статистические пакеты. Корреляционный анализ (нахождение статистической связи между процессами).
- 44 Сетевые информационные технологии. Общие принципы построения сетей; Локальные вычислительные сети; Организация сетевого программного обеспечения; Основные понятия и принципы построения глобальных сетей.
- 45 Сеть internet; Основные информационные службы internet; Корпоративные информационные системы internet.
- 46 Базы данных; Построение форм запросов, методы сортировки; Анализ СУБД Access, MySQL.
- 47 Приложения современных информационных технологий в области химической технологии. Обзор пакетов программ, используемых в химических технологиях. Основные понятия компьютерного моделирования химических производств.
- 48 Принципы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. Системы компьютерной математики и технологии для статистических расчетов.
- 49 Системы компьютерных технологий для инженерных расчетов.
- 50 Общие понятия о численных методах компьютерного моделирования химико-технологических процессов. Эмпирические модели. Принципы обработки данных пассивных экспериментов и планирование экспериментов.
- 51 Физико-химические модели. Построение моделей. Идентификация математического описания и оптимизация химико-технологических процессов.
- 52 Моделирование объектов химической технологии в среде ChemCAD.
- 53 Моделирование объектов химической технологии в среде MathCAD.
- 54 Проведение расчетов химико-технологических систем с помощью электронной таблицы Excel.
- 55 Ознакомление с программными средствами «Aspen Hysys Pro П», «CambridgeSoft ChemOffice».

Шкала оценивания: 5 балльная.

Каждый вопрос оценивается по дихотомической шкале: выполнено – 1 балл, не выполнено – 0 баллов.

Применяется следующая шкала перевода баллов в оценку по 5-балльной шкале:

5 баллов (или оценка «отлично») выставляется обучающемуся, если он демонстрирует глубокое знание содержания вопроса; дает точные определения основных понятий; аргументированно и логически стройно излагает учебный материал; иллюстрирует свой ответ актуальными примерами (типовыми и нестандартными), в том числе самостоятельно найденными; не нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

4 балла (или оценка «хорошо») выставляется обучающемуся, если он владеет содержанием вопроса, но допускает некоторые недочеты при ответе; допускает незначительные неточности при определении основных понятий; недостаточно

аргументированно и (или) логически стройно излагает учебный материал; иллюстрирует свой ответ типовыми примерами.

3 балла (или оценка «удовлетворительно») выставляется обучающемуся, если он освоил основные положения контролируемой темы, но недостаточно четко дает определение основных понятий и дефиниций; затрудняется при ответах на дополнительные вопросы; приводит недостаточное количество примеров для иллюстрирования своего ответа; нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

2 балла (или оценка «неудовлетворительно») выставляется обучающемуся, если он не владеет содержанием вопроса или допускает грубые ошибки; затрудняется дать основные определения; не может привести или приводит неправильные примеры; не отвечает на уточняющие и (или) дополнительные вопросы преподавателя или допускает при ответе на них грубые ошибки.

1.3 ТЕМЫ ДОКЛАДОВ

- 1 Этапы построения математической модели
- 2 Постановка задачи математического моделирования
- 3 Принципы классификации аппаратных средств и программного обеспечения информационных технологий для научной работы
- 4 Отличительные особенности системы компьютерных технологий для инженерных расчетов
- 5 Особенности анализа данных в табличных процессорах
- 6 Характеристика системы Mathcad
- 7 Характеристика системы Chemcad
- 8 Характеристика пакетов SPSS, STATGRAPHIK, Statistica
- 9 Основные типовые задачи химической технологии и их решение с помощью компьютерных технологий
- 10 Основной принцип построения научных баз данных
- 11 Обработка баз данных
- 12 Поиск в базах данных информации о веществах и химических реакциях
- 13 Осуществление построения форм запросов
- 14 Осуществление методов сортировки
- 15 Анализ СУБД Access
- 16 Анализ СУБД MySQL
- 17 Программный комплекс ISIS
- 18 Программный комплекс CambridgeSoft ChemOffice
- 19 Осуществление конструирования и разработка математических моделей процессов в CambridgeSoft ChemOffice
- 20 Специальные интерфейсы для химической технологии в CambridgeSoft ChemOffice
- 21 Программный комплекс «Aspen Hysys Pro II»
- 22 Общая характеристика экспертной системы
- 23 Принципы работы локальной и глобальной компьютерной сети
- 24 Интернет-ресурсы для химиков-технологов
- 25 Принципы поиска в Интернет
- 25 Особенности доступа к журналам по химии и химической технологии на серверах издательств
- 27 Вычислительный и натурный эксперименты. Формирование технического задания
- 28 Определение понятия химико-технологических систем
- 29 Структурная классификация химико-технологических систем
- 30 Статистические модели

- 31 Воспроизводимость эксперимента
- 32 Проверка воспроизводимости эксперимента по критерию Кохрена
- 33 Проверка воспроизводимости эксперимента по критерию Бартлетта
- 34 Вычисление погрешности эксперимента
- 35 Полный факторный эксперимент
- 36 Дробный факторный эксперимент
- 37 Планы второго порядка
- 38 Статистические модели множественной регрессии
- 39 Основы оптимизации химико-технологических процессов и систем
- 40 Постановка задачи оптимизации
- 41 Классификация задач оптимизации
- 42 Моделирование объектов химической технологии в среде ChemCAD
- 43 Моделирование объектов химической технологии в среде MathCAD
- 44 Общие понятия о численных методах компьютерного моделирования химико-технологических процессов
- 45 Эмпирические модели
- 46 Принципы обработки данных пассивных экспериментов и планирование экспериментов
- 47 Перечислить этапы разработки математической модели
- 48 Постановка задачи математического моделирования
- 49 Принципы классификации аппаратных средств и программного обеспечения информационных технологий для научной работы
- 50 Отличительные особенности системы компьютерных технологий для инженерных расчетов

Шкала оценивания: 5 балльная.

Каждый вопрос оценивается по дихотомической шкале: выполнено – 1 балл, не выполнено – 0 баллов.

Применяется следующая шкала перевода баллов в оценку по 5-балльной шкале:

5 баллов (или оценка «отлично») выставляется обучающемуся, если он демонстрирует глубокое знание содержания вопроса; дает точные определения основных понятий; аргументированно и логически стройно излагает учебный материал; иллюстрирует свой ответ актуальными примерами (типовыми и нестандартными), в том числе самостоятельно найденными; не нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

4 балла (или оценка «хорошо») выставляется обучающемуся, если он владеет содержанием вопроса, но допускает некоторые недочеты при ответе; допускает незначительные неточности при определении основных понятий; недостаточно аргументированно и (или) логически стройно излагает учебный материал; иллюстрирует свой ответ типовыми примерами.

3 балла (или оценка «удовлетворительно») выставляется обучающемуся, если он освоил основные положения контролируемой темы, но недостаточно четко дает определение основных понятий и дефиниций; затрудняется при ответах на дополнительные вопросы; приводит недостаточное количество примеров для иллюстрирования своего ответа; нуждается в уточняющих и (или) дополнительных вопросах преподавателя.

2 балла (или оценка «неудовлетворительно») выставляется обучающемуся, если он не владеет содержанием вопроса или допускает грубые ошибки; затрудняется дать основные определения; не может привести или приводит неправильные примеры; не отвечает на уточняющие и (или) дополнительные вопросы преподавателя или допускает при ответе на них грубые ошибки.

2 ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ

2.1 БАНК ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ В ТЕСТОВОЙ ФОРМЕ

1 Вопросы в закрытой форме.

1.1 Информационная технология –...

- А) совокупность методов и приемов решения типовых задач обработки информации;
- Б) программное обеспечение, используемое для решения типовых задач обработки информации;
- В) технические устройства, используемые при решении типовых информационных задач;
- Г) способ организации труда разработчиков и пользователей при решении типовых информационных задач;
- Д) совокупность методов, производственных процессов и программно-технических средств, объединенных в технологическую цепочку, обеспечивающую сбор, обработку, хранение, распространение и отображение информации.

1.2 Компьютер – это...

- А) это такой комплекс оборудования, который способен выполнять любые указания человека;
- Б) многофункциональное программируемое устройство, позволяющее вводить, обрабатывать и выводить информацию, решая различные прикладные задачи;
- В) это электронное устройство, которое выполняет операции ввода информации, хранения и обработки ее по определенной программе;
- Г) устройство, которое так же, как и человек, получает информацию, хранит и обрабатывает ее, обменивается ею с другими компьютерами;
- Д) устройство, способное принимать данные, выполнять над ними указанные операции.

1.3 Технология – это...

- А) комплекс организационных мер, операций и приемов, направленных на изготовление, обслуживание, ремонт и/или эксплуатацию изделия;
- Б) совокупность методов, процессов и материалов, используемых в какой-либо отрасли деятельности;
- В) устройства для распределения (доставки) сообщений, включая почтовые системы;
- Г) промышленные или иные процессы, которые предполагают использование научных или других знаний для решения определенных проблем или выпуска определенной продукции.

1.4 Информация – это...

- А) любые сведения, которые интересуют конкретного человека в конкретной ситуации;
- Б) методические указания, рекомендации, статьи, рефераты докладов, документы и т.п.;
- В) сведения о лицах, предметах, фактах, событиях, явлениях и процессах независимо от формы их представления;
- Г) сведения об объектах и явлениях окружающей среды, их параметрах, свойствах и состояниях, которые уменьшают имеющуюся о них степень неопределенности;
- Д) совокупность данных, повышающих уровень знаний об объективной реальности окружающего мира.

1.5 К свойствам информации относятся следующие:

- А) объективность;
- Б) объемность;

- В) актуальность;
- Г) полнота;
- Д) субъективность.

1.6 Доступность информации – это...

- А) состояние информации, при котором субъекты, имеющие право доступа, могут реализовывать их беспрепятственно;
- Б) степень соответствия информации текущему моменту времени;
- В) независимость от чьего-либо мнения или сознания;
- Г) мера возможности получить информацию.

1.7 Информацию измеряют ...

- А) количеством новизны;
- Б) числовой характеристикой сигнала, характеризующую неопределенность, которая исчезает после получения сообщения в виде данного сигнала;
- В) количеством символов в сообщении;
- Г) обычновенным голосованием;
- Д) в уменьшении неопределённости наших знаний об объекте.

1.8 Информационный продукт – это:

- А) документированная информация, представленная в форме товара;
- Б) электронная книга, выставленная для свободного распространения;
- В) программное обеспечение, выполненное на заказ;
- Г) обучающий курс, разработанный для конкретного случая;
- Д) результат любой информационной деятельности.

1.9 Перевод текста с английского языка на русский является процессом:

- А) обработки информации;
- Б) хранения информации;
- В) передачи информации;
- Г) поиска информации;
- Д) ни одним из перечисленных выше процессов.

1.10 Наибольший объем информации человек получает при помощи:

- А) осязания;
- Б) слуха;
- В) обоняния;
- Г) зрения;
- Д) вкусовых рецепторов.

1.11 Какое общество можно назвать «Информационное общество»:

- А) общество, в котором большинство работающих занято производством, хранением, переработкой и реализацией информации;
- Б) общество, в котором основной производительной силой выступают знания и информация;
- В) общество, характеризующееся высоким уровнем производства и потребления;
- Г) новая историческая фаза развития цивилизации, в которой главными продуктами производства являются информация и знания;
- Д) общество, которое в культурном, психологическом, социальном и экономическом отношениях формируется под воздействием техники и электроники.

1.12 Человек обладает информационной культурой, если

- А) его деятельность связана с областью культуры;
- Б) его уровень знаний, позволяет свободно ориентироваться в информационном пространстве;
- В) соблюдает совокупность норм, правил и стереотипов поведения, связанных с информационным обменом в обществе;
- Г) обладает разносторонним умением поиска нужной информации;

Д) умеет с достаточной скоростью вводить информацию с клавиатуры компьютера;

Е) соблюдает этические нормы при публикации информации в Интернет.

1.13 Первые механические вычислительные устройства (арифмометры) разработали:

- А) Б. Паскаль;
- Б) Г. Лейбниц;
- В) Ч. Беббидж;
- Г) Дж. Фон Нейман;
- Д) Ада Лавлейс.

1.14 Основные принципы функционирования ЭВМ сформулировали:

- А) Б. Паскаль;
- Б) Г. Лейбниц;
- В) Ч. Беббидж;
- Г) Дж. Фон Нейман;
- Д) Ада Лавлейс.

1.15 Принцип хранимой программы предложил:

- А) Бэббидж;
- Б) Тьюринг;
- В) Фон Нейман;
- Г) Ньютон.

1.16 К числу основных принципов функционирования ЭВМ не относится

- А) принцип хранимой программы;
- Б) принцип управляющей команды;
- В) принцип модульной структуры компьютера;
- Г) принцип использования сверхбыстрой памяти для выполнения операций;
- Д) принцип центрального управления компьютером с помощью процессора.

1.17 Первая действующая ЭВМ называлась:

- А) Марк-1;
- Б) Колосс;
- В) Урал;
- Г) ENIAC.

1.18 Самые мощные суперЭВМ представлены серией:

- А) PC;
- Б) Macintosh;
- В) Cray;
- Г) Apple.

1.19 Появление 3-го поколения ЭВМ было обусловлено:

- А) переходом от ламп к транзисторам;
- Б) переходом от транзисторов к интегральным микросхемам;
- В) переходом от интегральных микросхем к микропроцессору;
- Г) переходом от транзисторов к большим интегральным схемам.

1.20 Первая интегральная микросхема родилась в:

- А) 1959;
- Б) 1947;
- В) 1974;
- Г) 1961.

1.21 Первый массовый персональный компьютер был выпущен фирмой

- А) Apple;
- Б) IBM;
- В) Acer;
- Г) HPcard.

1.22 Подавляющее большинство современных машин являются:

- А) арифметико-логическими машинами;
- Б) машинами Тьюринга;
- В) фон-неймановскими машинами;
- Г) релейными машинами.

1.23 Архитектура – это ...

- А) общие принципы построения ЭВМ, реализующие программное управление работой и взаимодействием основных ее функциональных узлов;
- Б) общие принципы построения ЭВМ, не реализующие программное управление работой;
- В) дизайн внешнего вида ЭВМ;
- Г) принцип соединения внешних устройств к ЭВМ.

1.24 В минимальную комплектацию ПК входят:

- А) мышь, монитор, клавиатура, системный блок;
- Б) системный блок, дисплей, клавиатура, принтер;
- В) дисплей, системный блок, клавиатура;
- Г) клавиатура, жесткий диск, сканер, принтер;
- Д) монитор, системный блок, мышь, винчестер.

1.25 В системном блоке компьютера находятся:

- А) процессор, внутренняя память, CD-ROM, контроллеры внешних устройств, блок питания;
- Б) процессор, внутренняя память, дисковод, сканер, блок питания;
- В) процессор, внешняя память, контроллеры внешних устройств, блок питания, дисплей;
- Г) оперативная память, видеокарта, звуковая карта, кулер, блок питания.

1.26 На материнской плате компьютера находятся:

- А) драйверы, процессор, контроллеры;
- Б) ОЗУ, процессор, слоты;
- В) контроллеры, ОЗУ, винчестер;
- Г) чипсет; кэш-память, постоянная память.

1.27 Центральный процессор выполняет следующие функции

- А) выполняет арифметические и логические операции;
- Б) управляет процессами передачи данных;
- В) осуществляет физическое управление устройствами;
- Г) контролирует состояние устройств;
- Д) хранит активные программы и данные.

1.28 Основными характеристиками процессора являются:

- А) модель;
- Б) объем оперативной памяти;
- В) тактовая частота;
- Г) разрядность;
- Д) скорость обращения к внешним устройствам.

1.29 Оперативная память компьютера – это:

- А) память, предназначенная для временного хранения данных и команд, необходимых процессору для выполнения им операций;
- Б) маленькие схемы памяти, которые вставляются в материнскую плату;
- В) микросхема с записанным набором программ;
- Г) место длительного хранения данных.

1.30 Оперативная память предназначена для

- А) выполнения арифметических и логических операций;
- Б) управления процессами передачи данных;
- В) физического управления устройствами;

- Г) контроля состояния устройств;
- Д) хранения активных программ и данных.

1.31 "Любая информация в памяти компьютера состоит из ... и ...". Вместо многоточия вставить соответствующие высказывания:

- А) нулей; единиц;
- Б) слов; предложений;
- В) символов; знаков;
- Г) символов; слов;
- Д) цифр; букв.

1.32 Основными характеристиками памяти являются:

- А) емкость;
- Б) быстродействие;
- В) разрядность;
- Г) тактовая частота.

1.33 КЭШ память предназначена для...

- А) повышения производительности процессора;
- Б) временного хранения часто используемых данных;
- В) сохранения, накапливания и воспроизведения информации;
- Г) для хранения данных и программ, выполняемых в данный момент;
- Д) чтобы закачивать туда игры, музыку, фильмы.

1.34 Жесткий диск - это ...

- А) устройство ввода графической информации;
- Б) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
- В) устройство хранения данных с произвольным доступом;
- Г) устройство хранения данных на лазерных дисках с доступом Read Only;
- Д) устройство для соединения компьютеров в глобальную сеть.

1.35 Плоттер - ...

- А) устройство ввода графической информации;
- Б) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
- В) устройство хранения данных с произвольным доступом;
- Г) устройство вывода графической информации на бумажные носители;
- Д) устройство ввода управляющей информации.

1.36 Сканер - ...

- А) устройство ввода графической информации;
- Б) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
- В) устройство вывода графической информации на бумажные носители;
- Г) устройство хранения данных на лазерных дисках с доступом Read Only;
- Д) устройство ввода - вывода звуковой информации;
- Е) устройство для соединения компьютеров в глобальную сеть.

1.37 Звуковая карта - ...

- А) устройство ввода графической информации;
- Б) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
- В) устройство хранения данных с произвольным доступом;
- Г) устройство вывода графической информации на бумажные носители;
- Д) устройство ввода - вывода звуковой информации.

1.38 Сетевая плата - ...

- А) устройство вывода алфавитно-цифровой и графической информации;
- Б) устройство хранения данных с произвольным доступом;
- В) устройство для соединения компьютеров в локальную сеть;
- Г) устройство для соединения компьютеров в глобальную сеть;
- Д) устройство ввода управляющей информации.

1.39 Контроллеры внешних устройств - ...

- А) устройство для приема и передачи информации по телефонным каналам;
- Б) устройство передачи информации;
- В) способ обозначения сразу несколько имен файлов с помощью специальных символов;
- Г) специализированный процессор для управления внешними устройствами;
- Д) внешний носитель информации;
- Е) участок дорожки магнитного диска.

1.40 CD-ROM - ...

- А) устройство ввода алфавитно-цифровой и графической информации;
- Б) устройство хранения данных с произвольным доступом;
- В) устройство хранения данных на сменных лазерных дисках с доступом Read Only (Только для чтения);
- Г) устройство хранения данных на сменных лазерных дисках с возможностью перезаписи.

1.41 Сервер - ...

- А) компьютер или специализированное устройство в сети, ресурсы которого используются многими пользователями;
- Б) объект, который никогда не воздействует на другие объекты;
- В) основная программа, которая обеспечивает работу сайта;
- Г) муниципалитет в Испании;
- Д) программный компонент вычислительной системы, выполняющий функции по запросу клиента.

1.42 Компьютерная сеть -

- А) группа компьютеров, размещенных в одном помещении;
- Б) объединение нескольких ЭВМ для совместного решения задач;
- В) комплекс терминалов, подключенных каналами связи к большой ЭВМ;
- Г) мультимедийный компьютер с принтером, модемом и факсом;
- Д) система связи между двумя или более компьютерами.

1.43 Локальная сеть -

- А) совокупность компьютеров, объединенных на основе кабельного соединения;
- Б) совокупность компьютеров, объединенных на основе телефонных каналов связи;
- В) комплекс объединенных компьютеров для совместного решения задач;
- Г) группа компьютеров в одном здании;
- Д) система соединения компьютеров, характеризующаяся высокой скоростью передачи информации и высокой интенсивностью обмена.

1.44 Что не характерно для локальной сети

- А) большая скорость передачи информации;
- Б) большая пропускная способность сети;
- В) возможность обмена информацией на большие расстояния;
- Г) наличие связующего для всех абонентов высокоскоростного канала для передачи информации в цифровом виде;
- Д) заранее четко ограниченное количество компьютеров, подключаемых к сети.

1.45 Какие линии связи используются для построения локальных сетей:

- А) только витая пара;
- Б) только оптоволокно;
- В) только толстый и тонкий коаксиальный кабель;
- Г) витая пара, коаксиальный кабель, оптоволокно и беспроводные линии связи.

1.46 Модем является техническим устройством для поддержки

- А) технологий баз данных;
- Б) технологий программирования;

В) телекоммуникационных технологий;

Г) офисных технологий.

1.47 Что такое электронная библиотека?

А) Совокупность лексикографических баз данных, т.е. совокупность словарей, сформированных по отдельным элементам библиографического описания;

Б) База данных, содержащая библиографические описания документов;

В) Библиотечный каталог в машиночитаемой форме, работающий в реальном режиме времени;

Г) Совокупность данных, расположенных в файле, объединенных назначением хранимой информации;

1.48 Электронные библиотеки в Интернете содержат ...

А) цифровые копии печатных книг;

Б) электронные почты;

В) архив адресов;

Г) справочники.

1.49 Какие текстовые форматы используют электронные книги?

А) TXT;

Б) RAR;

В) DOC;

Г) APK.

1.50 В какой формат переводятся книги с формулами и схемами?

А) TXT;

Б) MP3;

В) PDF;

Г) PPK.

1.51 Что такое chemistry Development Kit?

А) Компьютерное программное обеспечение, библиотека для хемоинформатики и биоинформатики;

Б) Техническое устройство для решения информационных задач;

В) Совокупность методов, производственных процессов и программно-технических, объединённых в цепочку, обеспечивающую сбор, обработку, хранения, распространение и отображение информации;

Г) Программное обеспечение для обработки информации.

1.52 Какой язык используется в программе chemistry Development Kit?

А) Паскаль;

Б) Фортран;

В) Basic;

Г) Java.

1.53 Кто из перечисленных является создателем chemistry Development Kit?

А) Кристофом Стейнбеком;

Б) Раджарши Гуха;

В) Деннис Ритчи;

Г) Никлаус Вирт.

1.54 В каком году был создан chemistry Development Kit?

А) 2001 г;

Б) 2000 г;

В) 2003 г;

Г) 1997 г.

1.55 Для каких междисциплинарных дисциплин предусмотрены функциональные возможности chemistry Development Kit?

А) Психоллингвистика и Медиаведение;

Б) Теоретическая география и Теории архитектуры;

В) Смежные с социологией междисциплинарные науки;

Г) Хемоинформатика и Биоинформатика.

1.56 Учеными какого университета был разработан Chemistry Development Kit?

А) Университете Нотр-Дам;

Б) Оксфордский университет;

В) Гарвардский университет;

Г) Массачусетский технологический институт.

1.57 Какие из перечисленных функциональных возможностей включает в себя Chemistry Development Kit?

А) Представление валентной связи молекулы и реакции;

Б) Генерация и визуализация координат;

В) Подструктура и поиск шаблонов SMARTS;

Г) Чтение и запись форматов файлов: SMILES, SDF, InChI, Mol2, CML;

Д) Канонические идентификаторы для быстрого точного поиска;

Е) Все варианты верны.

1.58 Какие функции Chemistry Development Kit предусмотрены для Хемоинформатики?

А) 2D-диаграмм;

Б) 3D-геометрии;

В) обнаружение активного сайта белка;

Г) идентификация метаболитов базы данных путей;

Д) поиск подструктур с использованием точных структур и интеллектуальных запросов.

1.59 Какие функции Chemistry Development Kit предусмотрены для Биоинформатики?

А) 2D-диаграмм;

Б) 3D-геометрии;

В) обнаружение активного сайта белка;

Г) идентификация метаболитов базы данных путей;

Д) поиск подструктур с использованием точных структур и интеллектуальных запросов;

1.60 Кто разработал систему ночной сборки для Chemistry Development Kit?

А) Кристофом Стейнбеком;

Б) Раджарши Гуха;

В) Деннис Ритчи;

Г) Никлаус Вирт.

1.61 Как называется систему ночной сборки Chemistry Development Kit?

А) Nightly;

Б) Java;

В) SMARTS;

Г) CML.

1.62 Chemistry Development Kit был создан для обеспечения общей кодовой базы. Первый выпуск исходного кода был выпущен ...

А) 11 мая 2011;

Б) 27 сентября 2000;

В) 3 мая 1997;

Г) 5 августа 2001.

1.63 Чтобы уменьшить путаницу среди пользователей, был создан проект

А) ChemoJava

Б) Java

В) GNU Lesser General Public License

Г) LGPL 2.0

1.64 Какая система была разработана Раджарши Гуха которая до сих пор работает в Университете Уппсалы;

- А) Систему ночной сборки Nightly;
- Б) Набор для разработки химии;
- В) GNU Lesser General Public License;
- Г) Плагин Taverna workbench.

1.65 Как называется расширения Chemistry Development Kit для информационного майнера Констанца (KNIME) и для Excel

- А) SMARTS;
- Б) LICSS;
- В) Nightly;
- Г) Java.

1.66 ACD / ChemSketch - ...

А) это химически интеллектуальный настольный инструментарий, созданный для того, чтобы помочь вам рисовать, редактировать, публиковать, отображать, импортировать и экспортировать ваши химические структуры, а также позволяет конвертировать различные химические и графические форматы файлов;

Б) это химически интеллектуальный интерфейс для рисования, который позволяет рисовать практически любую химическую структуру, включая органику, металлоорганические соединения, полимеры и структуры Маркуша;

В) это бесплатный, фантастически простой в использовании редактор молекул. Поскольку этот редактор является кроссплатформенным и позволяет использовать компьютерные ресурсы, вы можете запускать его тогда и там, где вам это нужно;

Г) это высокоэффективное и многофункциональное приложение, которое поможет вам создавать сложные химические документы или рисовать простые молекулы, которые можно использовать в ваших публикациях и проектах.

1.67 Пакет ACD/Labs Freeware состоит из какого количества автономных, но взаимосвязанных программ? Запишите названия ниже.

- А) 2;
- Б) 4;
- В) 1;
- Г) 3.

1.68 ChemSketch работает в двух режимах:

- А) Draw, text editor;
- Б) Structure, table processors;
- В) Text editor, animated graphics;
- Г) Structure, draw.

1.69 Как в ChemSketch называется кнопка для рисования цепи?

- А) Draw Normal;
- Б) Draw Chains;
- В) Draw Continuous;
- Г) Draw a Circle.

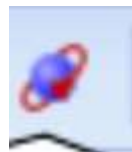
1.70 Что означает каждая из кнопок?



1



2



3



4

- А) Выделить и вращать в трехмерном пространстве;
- Б) Выделить/Переместить - для перемещения в плоскости листа атома, связи, всей структуры или ее фрагмента;
- В) Лассо для выделения;

Г) Выделить/Вращать/Изменить размер - вращение выделенного фрагмента вокруг его центра в плоскости листа (центр будет отображен красным плюсом).

1.71 Полезные команды в меню. Раздел Tools. Выберите правильные ответы:

А) На экране можно показывать или скрывать те атомы водорода, которые насыщают свободные валентности (Explicit Hydrogens).

Б) Программа умеет генерировать систематическое название, R/S-стереодескрипторы, коды SMILES и InChI, а также генерировать структурные формулы по известным кодам SMILES и InChI.

В) Программа умеет рассчитывать физико-химические параметры вещества.

Г) Все ответы верные.

1.72 Как называется команда, которая позволяет скрыть атомы водорода:

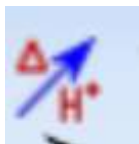
А) Remove Explicit Hydrogens;

Б) Add Explicit Hydrogens;

В) Auto Renumbering;

Г) Calculate.

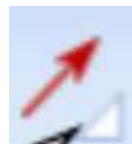
1.73 Что означает каждая их кнопок блока для написания уравнений химических реакций:



1



2



3



4

А) Знак "плюс";

Б) Калькулятор реагентов;

В) Стрелка между левой и правой частями уравнения;

Г) Для написания текста над стрелкой и под стрелкой.

1.74 Укажите правильную последовательность: если при отображении полимера необходимо указать концевую связь без атома, концевой атом заменяют "псевдо-атомом":

А) Щелкнуть по кнопке "Псевдо-атом";

Б) В левой колонке щелкнуть по треугольнику кнопки R - открывается список

В) Щелкнуть в структуре по концевым атомам углерода.

1.75 Для изменения положения атомов водорода, для изменения вида двойной связи следует при нажатой кнопке щелкать по группе СН_n или по связи. Какая кнопка является верной?



А



Б



В



Г

1.76 Вращение на 180° вокруг связи — при нажатой кнопке следует щелкнуть по соответствующей связи.



А



Б



В



Г

1.77 Что означает данная кнопка?



А) Вращение на 180° по осям x и y;

Б) «Полимер»;

В) Для разворота структуры в плоскости листа так, чтобы указанная связь оказалась горизонтальной или вертикальной;

Г) Для изменения положения атомов водорода.

1.78 Какой из параметров не появляется в окошке, при нажатии на кнопку «Полимер»?

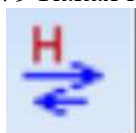
А) Generate;

Б) Index;

В) Connectivity;

Г) Style.

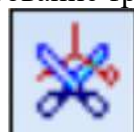
1.79 Какая из полезных кнопок означает генерирование трехмерной структуры?



А



Б



В



Г

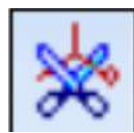
1.80 Какая из полезных кнопок означает генерирование устойчивых таутомерных форм?



А



Б



В



Г

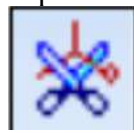
1.81 Какая из полезных кнопок означает расчет теоретического значения LogP?



А



Б

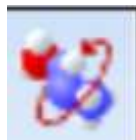


В



Г

1.82 Что означает данная кнопка?



1.83 В каком году была выпущена первая версия ACD/ChemDraw?

А) 2000 г.;

Б) 1997 г.;

В) 1993 г.;

Г) 1995 г.

1.84 Основной формат файлов в ACD / ChemSketch:

А) wav;

Б) bak;

В) html;

Г) sk2.

1.85 Что такое «JChemPaint»?

А) многофункциональная программа для молекулярного 3D моделирования;

Б) это редактор и средство просмотра 2D-химических структур;

В) программа для построения калибровочных графиков;

Г) редактор виртуального химического синтеза.

1.86 В каких языках программирования он реализован?

А) Python;

Б) C++;

В) Java;

Г) Arduino.

1.87 Какие модели структур можно воспроизвести в химическом редакторе?

- А) 2D;
- Б) 3D;
- В) Как 2D так и 3D.

1.88 В каком году был создан этот редактор?

- А) 1997;
- Б) 2000;
- В) 2005;
- Г) 2009.

1.89 На какой операционной системе поддерживается химический редактор?

- А) Windows;
- Б) Linux;
- В) UNIX;
- Г) Apple;
- Д) Программа кроссплатформенная.

1.90 Сколько версий у программы JChemPaint?

- А) 1;
- Б) 2;
- В) 3;
- Г) 4;

1.91 JChemPaint, кроме визуального создания и редактирования структур, позволяет:

А) определять химические реакции, задавая реагенты, продукты реакции и катализаторы;

Б) строить графики зависимости различных параметров;

В) рассчитать термодинамические характеристики;

Г) прогнозировать химические свойства.

1.92 Программой поддерживается?

А) импорт структур в форматах SMILES и MDL;

Б) экспорт структур в форматах Chemical Markup Language и MDL;

В) импорт структур в формате SMILES и экспорт структур в формате MDL;

Г) и импорт, и экспорт структур в форматах SMILES, Chemical Markup Language и MDL.

1.93 Интерфейс приложения представляет собой:

А) белый фон с функциональными окнами вызова по периметру экрана;

Б) белый фон в клетку с функциональными окнами вызова справа экрана;

В) чёрный фон с функциональными окнами вызова с лева экрана;

Г) синий фон с функцией вызова с помощью мышки и клавиатуры.

1.94 В редакторе нет функций ...

А) Отменить и Повторить;

Б) Увеличить и Уменьшить;

В) Сохранить как картинку;

Г) Переупорядочить структуры.

1.95 Слева по вертикали расположены функции:

А) выбора из шаблонов;

Б) молекулярных связей;

В) вставки циклических связей;

Г) вставки элементов из таблицы.

1.96 Можно ли в редакторе повернуть молекулу в пространстве?

А) да;

Б) нет;

В) в зависимости от молекулы.

1.97 В программе JChemPaint ...

- А) есть база шаблонов;
- Б) нет базы шаблонов;
- В) шаблоны нужно создавать самому и вносить в базу.

1.98 При рисовании в JChemPaint связей и атомов на вершинах автоматически размещаются атомы:

- А) водорода;
- Б) углерода;
- В) азота;
- Г) кислорода.

1.99 Выберите правильный ответ для JChemPaint.

А) для вставки другого элементов в углеродную связь нужно вызвать периодическую систему;

Б) для вставки другого элементов в углеродную связь нужно воспользоваться клавиатурой;

В) оба утверждения верны.

1.100 Для того, чтобы распечатать проделанную работу, нужно:

- А) сохранить как картинку и только после распечатать;
- Б) сохранить в формате Word и после распечатать;
- В) сохранить в новом приложении и после распечатать;
- Г) на панели имеется функция печати бес посредних действий.

1.101 Среди циклических связей нет ...

- А) пентанового цикла;
- Б) гексанового цикла;
- В) гептанового цикла;
- Г) октанового цикла;

1.102 В JChemPaint на каком языке функционирует редактор?

- А) на английском;
- Б) на русском;
- В) на латинском;
- Г) на китайском.

1.103 Когда выпущена последняя версия программы?

- А) 2010;
- Б) 2012;
- В) 2014;
- Г) 2016.

1.104 На каких условиях распространяется программа JChemPaint?

- А) с лицензией;
- Б) без лицензии;
- В) как с лицензией, так и без неё.

1.105 Основная цель AcidBaseLab:

- А) делать расчет кривой титрования;
- графически отображать структуру молекул;
- создавать химические 3D модели;
- отслеживать процесс химической реакции.

1.106 Титрование - ...

А) процесс определения концентрации исследуемого вещества путем добавления раствора титранта к раствору титруемого вещества по каплям;

Б) Добавление раствора анализируемого вещества к раствору известной концентрации;

В) Произвольное приливание стандартного раствора в присутствии индикатора до изменения окраски;

Г) Только произвольное добавление стандартного раствора в присутствии индикатора до изменения окраски.

1.107 Укажите требования, которым должны удовлетворять реакции титрования: а) реакция должна быть стехиометрической, б) желательно возможно большая величина молярной массы эквивалента вещества. с) реакция должна протекать количественно (общий критерий – на 99,9 %), d) реакция должна протекать с достаточно высокой скоростью. е) вещества должны быть устойчивыми как при хранении в твердом виде, так и в растворе; f) должно быть вещество для фиксации конца титрования (индикатор).

А) Все;

Б) а, b, с, е, f;

В) а, b, d, е, f;

Г) а, с, d, f.

1.108 Может ли водородный показатель быть:

А) Равным 0

1) да

Б) Равным 14

В) Равным > 14

2) нет

Г) Равным < 0

1.108 Чему равна концентрация водородных ионов $[H^+]$, моль/л, если:

А) $pH = 3$

а) 0

Б) $pH = 7$

б) 10^{-7}

В) $pH = 14$

в) 10^{-3}

г) 10^{-14}

1.109 Какой среде соответствует значение $pH = 9$

А) кислой;

Б) нейтральной;

В) щелочной.

1.110 Как изменится pH , если разбавить вдвое раствор $0,2 CH_3COOH$

А) Увеличится;

Б) Уменьшится;

В) Не изменится.

1.111 В точке эквивалентности доля равна:

А) 0;

Б) 1;

В) 2;

Г) -1;

1.112 Укажите неправильный вариант:

А) с AcidBaseLab возможно отслеживание изменение цвета раствора во время титрования

Б) с AcidBaseLab можно выполнять любые pH расчёты

В) AcidBaseLab может быть использована для моделирования реальных экспериментов титрования

Г) с AcidBaseLab можно создавать химические 3D модели

1.113 Интервал изменения окраски индикатора зависит от ...

А) концентрации индикатора

Б) константы диссоциации индикатора

В) значения pH титруемого раствора

Г) интенсивности окраски индикатора

1.114 В титриметрическом анализе титрантом называется:

А) исследуемый раствор;

Б) рабочий раствор;

В) любой раствор, используемый для анализа;

Г) раствор индикатора.

- 1.115 Для определения точки эквивалентности в титриметрии используют:
- А) кривые титрования;
 - Б) растворы индикаторов;
 - В) зависимость скорости реакции от температуры;
 - Г) зависимость скорости реакции от природы исходных веществ.
- 1.116 Кривые титрования показывают зависимость:
- А) скорости химической реакции между титрантом и исследуемым веществом от времени;
 - Б) концентрации определяемого вещества от объёма добавленного титранта;
 - В) какой-либо физической характеристики исследуемого раствора от объёма добавленного титранта;
 - Г) концентрации исследуемого вещества от времени реакции.
- 1.117 Точка эквивалентности совпадает с точкой нейтральности ($\text{pH} = 7$) на ...
- А) кривой титрования;
 - Б) при титровании слабой кислоты сильным основанием;
 - В) при титровании сильной кислоты сильным основанием и, наоборот; всегда;
 - Г) при титровании слабого основания сильной кислотой;
- 1.118 Точка эквивалентности лежит на кривой титрования при $\text{pH} > 7$ в случае:
- А) титрования сильной кислоты сильным основанием и, наоборот;
 - Б) титрования слабого основания сильной кислотой;
 - В) титрования слабой кислоты сильным основанием;
 - Г) титрования слабого основания слабой кислотой.
- 1.119 Точка эквивалентности лежит на кривой титрования при $\text{pH} < 7$ в случае:
- А) титрования сильной кислоты сильным основанием и, наоборот;
 - Б) титрования слабого основания сильной кислотой;
 - В) титрования слабой кислоты сильным основанием;
 - Г) титрования слабого основания слабой кислотой.
- 1.120 Выберите правильные характеристики для кривых титрования:
- А) скачок титрования не зависит от концентрации титруемого раствора и титранта;
 - Б) вблизи точки эквивалентности наблюдается резкий скачок pH ;
 - В) для фиксирования точки эквивалентности при кислотно-основном титровании можно использовать любой индикатор, интервал перехода окраски которого лежит в пределах скачка pH на кривой титрования;
 - Г) при титровании сильной кислоты сильным основанием можно использовать только те индикаторы, у которых $\text{pH} = 7$.
- 1.121 В каком году был первый выпуск программы Авогадро?
- А) 2016;
 - Б) 2008;
 - В) 2021;
 - Г) 2001;
- 1.122 На скольких языках доступна программа Авогадро?
- А) 8;
 - Б) 2;
 - В) 16;
 - Г) 5;
- 1.123 Язык программирования Авогадро?
- А) Python;
 - Б) Java в Arduino;
 - В) C++, QT;
- 1.124 Для чего была создана программа Авогадро?
- А) для средства проверки химических формул и структур;

- Б) для расчета числа Авогадро;
- В) для визуального наблюдения и редактирования молекулярных структур;
- Г) редактор химической графики.

1.125 В верхней строке меню имеется команда:

- А) Display Types;
- Б) Stick;
- В) Help;
- Г) Element.

1.126 Число Авогадро равно:

- А) $6 \cdot 10^{-23}$;
- Б) $6 \cdot 10^{23}$;
- В) $3 \cdot 10^{23}$;
- Г) $-3 \cdot 10^{23}$.

1.127 В чем измеряется длина ребер?

- А) радиан;
- Б) мм;
- В) ангстрем;
- Г) Нанометр.

1.128 Как сделать анимацию (последовательность действий)?

- А) auto rotation tool;
- Б) extensions → molecular mechanics → setup force field;
- В) click to measure;
- Г) extensions → animation → loadfile → saveas.

1.129 Программа Авогадро НЕ обладает следующими инструментами:

- А) инструменты для выравнивания;
- Б) инструменты для визуализации;
- В) обладает всеми перечисленными;
- Г) не обладает никакими из перечисленных.

1.130 Что обозначает флажок «Show Angels» в инструменте установления центральной связи?

- А) при вращении мышью плоскость меняется с желтой на синий;
- Б) отображение углов выбранной связи ко всем соседним связям;
- В) вращение фрагмента в нужном положении;
- Г) автоматически вычисляется расстояния между атомами в соответствующем

порядке.

1.131 Для того чтобы спроектировать нанотрубку, нужно найти в меню:

- А) «View»;
- Б) «Sequence»;
- В) «Build»;
- Г) «Crystallography».

1.132 Выберите язык программирования XDrawChem

- А) C++;
- Б) Java;
- В) Python;
- Г) C#.

1.133 XDrawChem является:

- А) приложением 3D-моделирования;
- Б) двумерной молекулярной графической программой;
- В) химический калькулятор реакций;
- Г) программа моделирования сложных параллельно-последовательных реакций.

1.134 Что не определяет программа XDrawChem?

- А) рКа;

- Б) коэффициент распределения октанол-вода;
- В) изменение энтальпии газовой фазы;
- Г) s, p, d, f – орбитали для атомов.

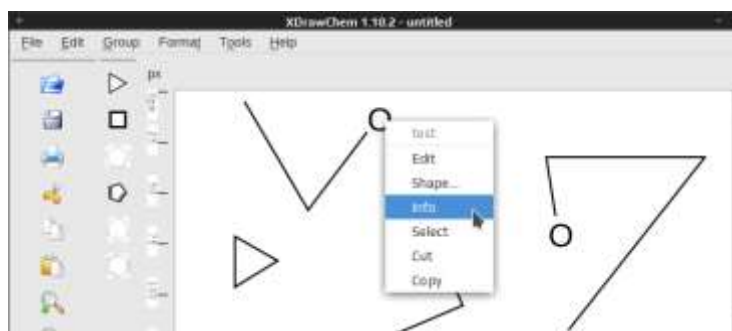
1.135 Программа XDrawChem информацию о составе и структуре молекул веществ не позволяет:

- А) видеовоспроизводить;
- Б) вводить;
- В) редактировать;
- Г) выводить на внешние носители.

1.136 Программа XDrawChem имеет аналог для MAC OS, как он называется:

- А) JChemPaint;
- Б) WinDrawChem;
- В) ChemDraw;
- Г) Jmol.

1.137 Что произойдет, если мы выберем отдел вкладка «Info», изображенный на рис?



- А) Получим информацию о составе и структуре молекул веществ;
- Б) Выведем все стандартные аминокислоты и нуклеиновые кислоты из встроенной библиотеки;
- В) Извлечем структуры из сетевой базы данных;
- Г) Выравниваем фигуру молекулы.

1.138 Каким образом не осуществляется поиск вещества в программе XDrawChem?

- А) По названию вещества;
- Б) По брутто-формуле;
- В) По CAS PN и иным регистрационным номерам;
- Г) По LnChIKey.

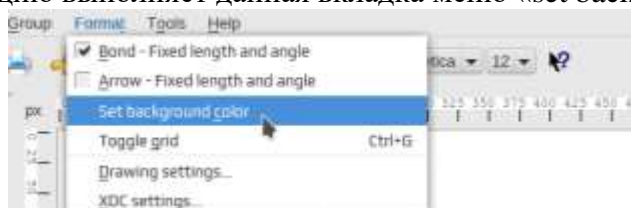
1.139 XDrawChem не поддерживает работу с форматами ...

- А) CDX, CDXML и CHM;
- Б) XML;
- В) PNG, BMP, EPS и SVG;
- Г) AVI, MPG.

1.140 XDrawChem с помощью внешних приложений может ...

- А) генерировать трёхмерные молекулярные модели;
- Б) видеопроектировать процесс реакции или синтеза;
- В) визуализировать орбитали;
- Г) моделировать газодинамику процесса.

1.140 Какую функцию выполняет данная вкладка меню «set background color»



- А) перемещение панели инструментов;

- Б) отключение панели инструментов;
- В) редактирование химических структур;
- Г) инструмент для отрисовки фона.

1.141 Выберите функции программы XDrawChem.

- А) Автоматическое выравнивание фигур;
- Б) Обнаружение структур, текста и стрелок, а также их автоматическое размещение;
- В) Генерирование трёхмерных молекулярных моделей;
- Г) Извлечение структур из сетевой базы данных;
- Д) Визуализирование орбиталей атомов;
- Е) Извлечение информации о молекуле.

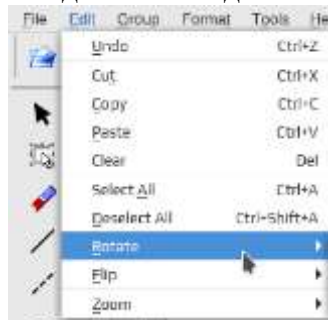
1.142 Год создания программы XDrawChem:

- А) 2011;
- Б) 2002;
- В) 2005;
- Г) 2007.

1.143 Какой из перечисленных форматов для сохранения в программе XDrawChem является её собственным форматом?

- А) *.cml;
- Б) *.cif;
- В) *.mol;
- Г) *.xdc;
- Д) *.ent;
- Е) *.vis.

1.144 Какую функцию выполняет данная вкладка меню «Rotate»?



- А) Расположение молекулы с учетом длины и углов связи;
- Б) Построение 3D-изображения;
- В) Моделирование геометрических параметров молекулы;
- Г) Интерактивная визуализация молекул.

1.145 Выберите правильное описание логотипа программы XDrawChem

- А) Зеленый фон с изображением серых букв XDC и карандаша;
- Б) Серый фон с изображением карандаша и структуры молекулы;
- В) Синий фон с изображением букв XDC и структуры молекулы;
- Г) Серый фон с изображением букв XDC.

1.146 Какие основные задачи помогает решать программа Orbital Viewer:

- А) Построение сложных молекул, химических формул;
- Б) Предсказывание спектра вещества, используя данные о структуре, и визуализировать объемные модели молекул и орбиталей с помощью модуля MORAC;
- В) Программа для расчета и визуализации атомных и молекулярных электронных орбиталей;
- Г) Создание 3D-моделей молекул, построение структур любого органического соединения.

1.147 Как отображаются орбитали в программе Orbital Viewer:

- А) Орбитали могут отображаться в виде точек, каркасной модели и поверхностей;
- Б) Орбитали могут отображаться в виде точек, поверхностей и математической модели;
- В) Орбитали могут отображаться в виде каркасной модели и поверхности;
- Г) Орбитали могут отображаться в виде точек.

1.148 Какие возможности по управлению изображений предоставляет программа Orbital Viewer:

- А) Пользователь не может управлять изображением;
- Б) Пользователь может управлять изображением;
- В) Пользователь может управлять изображением, в том числе, возможно получение изображения в стереорежиме. А также графическое редактирование изображения с помощью графических инструментов;
- Г) Пользователь может управлять изображением, в том числе, возможно получение изображения в стереорежиме.

1.148 Какие операционные системы поддерживают программу?

- А) Windows Vista, XP, 2000;
- Б) Windows XP, Vista, 7, 8, 8.1 и 10;
- В) Linux;
- Г) POSIX.

1.149 Какие орбитали позволяет смотреть программа?

- А) s, p, d, f;
- Б) s, p;
- В) s;
- Г) s, p, d.

1.150 Какие форматы файлов поддерживает программа?

- А) TIFF, PPM, BMP, AVI и VRML;
- Б) mono, mpc, mrw, MTV, mvg, nef, orf, otb;
- В) pfm, pgm, picon, pict, pix, png, pnm, ppm;
- Г) epdf, html, pdf, shtml, doc, docx, xls, xlsx, pptx.

2 Вопросы в открытой форме.

2.1 Доступность информации –...

2.2 Термодинамическое моделирование является разновидностью математического моделирования, ...

2.3 Компонентами модели являются ...

2.4 Программа Chemical WorkBench является ...

2.5 Chemical WorkBench дает возможность ...

2.6 Пакет программного обеспечения CHEMKIN содержит ...

2.7 В состав CHEMKIN входят...

2.8 Программное обеспечение Kintecus для моделирования процессов в ядерных установках, в биологических системах, в атмосфере, процессов горения и многих других процессов, сопровождающихся химическими превращениями, имеет отличительную черту

2.9 Kintecus позволяет исследовать изотермические и неизотермические процессы, а также

2.10 - Программный комплекс MTDATA используется для ...

2.11 Программный комплекс MTDATA ориентирован на ...

2.12 С помощью MTDATA можно анализировать проблемы смешанного характера, например,

2.13 Программа Thermo-Calc предназначена для ...

- 2.14 При разработке программы Thermo-Calc особое внимание уделялось возможности ...
- 2.15 Thermo-Calc содержит несколько модулей, при помощи которых ...
- 2.16 Наиболее важный модуль программы Thermo-Calc, предназначенный для расчета равновесного состава, предоставляет ...
- 2.17 Программный комплекс HSC Chemistry, предназначенный для моделирования ...
- 2.18 Число веществ, информация о которых содержится в базе данных HSC Chemistry, превышает
- 2.19 В базе данных HSC Chemistry предусмотрены поля для структурной формулы...
- 2.20 Программный комплекс EQS4WIN, предназначенный для решения ...
- 2.21 При создании программы EQS4WIN использованы современные технологии ...
- 2.22 При разработке алгоритма EQS4WIN использован подход, основанный на ...
- 2.23 Программа позволяет рассчитывать равновесный состав в системах, содержащих до 3-х конденсированных растворов, газовую фазу и неограниченное число однокомпонентных конденсированных фаз. В состав всех версий программного комплекса входит база данных по термодинамическим свойствам веществ, сведения в которой заимствованы из таблиц JANAF.
- 2.24 ThermoChemical Calculator (TCC) - интерактивная программа для ...
- 2.25 При разработке программы ThermoChemical Calculator использован текст ...
- 2.26 TCC сопряжен с базой данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ, которая ...
- 2.27 Программное обеспечение OLI создано для моделирования
- 2.28 Основой программного обеспечения OLI является ...
- 2.29 Термодинамический программный комплекс OLI позволяет анализировать ...
- 2.30 База данных OLI содержит термодинамические, транспортные и физические свойства веществ, образованных из ...
- 2.31 Принципиальной особенностью системы ИВТАНТЕРМО, отличающей ее от подавляющего числа аналогичных банков данных, является ...
- 2.32 Соответствующие обработка и расчеты в ИВТАНТЕРМО выполняются с помощью комплекса методов, алгоритмов и программ, созданных при
- 2.33 База данных ИВТАНТЕРМО содержит сведения о ...
- 2.34 THERBASE предоставляет доступ ко всей информации о веществах, хранящейся в базе данных, а именно
- 2.35 Программа THERBASE позволяет осуществлять ...
- 2.36 THERBASE может отображать информацию в форматах таблиц ТСИБ и JANAF, построенных в ...
- 2.37 Программа APPROX предназначена для расчета коэффициентов аппроксимирующего полинома, если заданы ...
- 2.38 Результаты расчетов в APPROX могут быть записаны в ...
- 2.39 НВ предназначена для расчета теплового и материального баланса между группой исходных веществ и группой продуктов реакции, если ...
- 2.40 Химическая программа Chemical Equilibrium with Applications (CEA) вычисляет баланс концентрации химических продуктов из
- 2.41 Встроенные приложения Chemical Equilibrium with Applications включают вычисление
- 2.42 Для удобства эксплуатации программы Chemical Equilibrium with Applications предоставлена возможность использования...
- 2.43 Полнофункциональная программа моделирования молекулярной механики и динамики АММР может манипулировать как небольшими молекулами, так и ...

2.44 Одни из основных преимуществ АММР является...

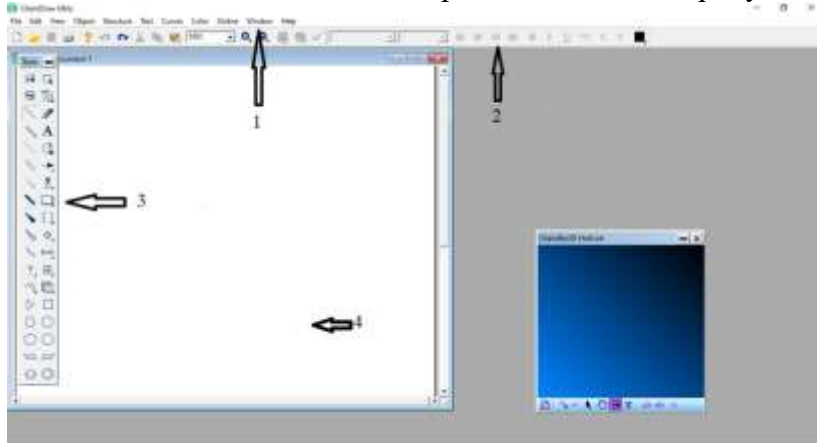
2.45 Программа CambridgeSoft ChemBioOffice Ultra 2010 v12.0 используется для ...

2.46 Дополните определение. XDrawChem - ... приложение для отрисовки и ... химических структур.

2.47 Дополните определение. Молекулярный редактор - специализированное приложение, позволяющее ..., ... и ... на внешние носители информацию о составе и структуре молекул веществ.

2.48 Дополните определение. Информационные технологии в химии могут применяться в виде ... (например, спектрофотометры) и ... (электронные ресурсы, программы)

2.49 Напишите обозначения к представленным на рисунке цифрам:



2.50 Вставьте пропущенное слово: экспериментально конец титрования устанавливается по изменению цвета ..., эта точка называется конечной точкой титрования

2.51 Продолжите фразу: Набор для разработки химии (Chemistry Development Kit) представляет собой ...

2.52 Допишите предложение: Точка эквивалентности - ...

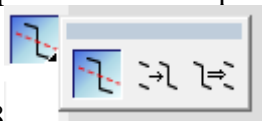
2.53 Вставьте пропущенное слово: Доля титрования - это отношение количества ..., израсходованного в определенный момент, к его количеству в точке эквивалентности.

2.54 В ChemDraw реализована возможность генерирования названия молекулярной структуры в соответствии с правилами.....

2.55 Через какую кнопку доступна функция проверки на наличие ошибок?

2.56 Обратный процесс генерирования названия структуры ...

2.57 Что можно узнать, нарисовав конкретную молекулу и, выделив ее с помощью одной из трех кнопок контрольной панели, затем, нажав кнопку View главного меню?



2.58 — это

2.59 Для того чтобы в требуемой схеме указать буквы греческого алфавита (α , β , γ и т. д.), единицы измерения длины связей \AA , температурные условия протекания реакции в градусах и т. п., можно воспользоваться панелью.....

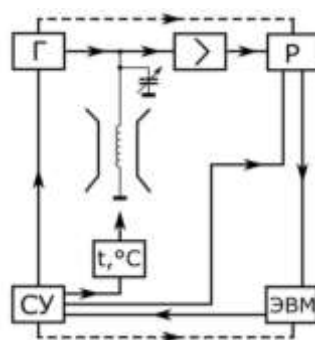
2.60 Реакционный центр - ...

2.61 Наиболее важная часть реакции - ...

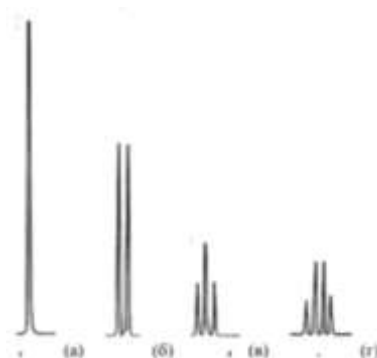
2.62 Заполните пропуски. ChemLab - ..., которое ...

2.63 Магнитный момент ядра (μ) связан с собственным моментом количества движения (p) соотношением $\mu = \gamma p = \gamma \hbar I$. Расшифруйте составляющие формулы.

2.64 Опишите схему прибора для наблюдения ЯМР

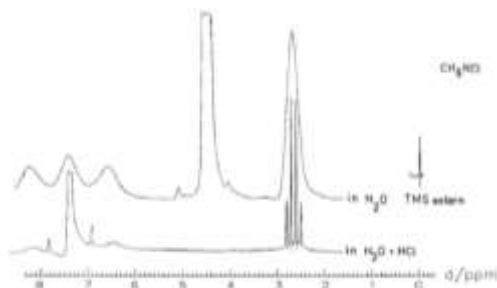


2.65 Обозначьте название и обозначение сигналов ЯМР спектра, приведенных на картинке

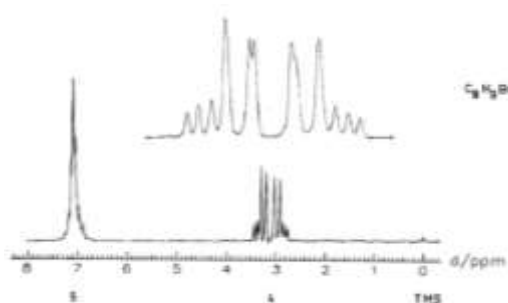


2.66 Напишите общие правила для интерпретации спектров ^{13}C

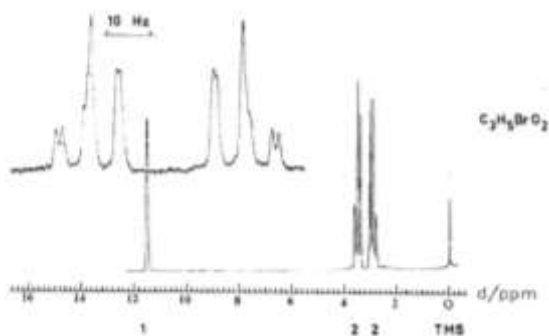
. Определите строение молекулы соединения по заданной брутто-формуле и спектру ^1H ЯМР. Спектры сняты на приборе с рабочей частотой 60 МГц в растворе в CCl_4 .



2.67 Определите строение молекулы соединения по заданной брутто-формуле и спектру ^1H ЯМР. Спектры сняты на приборе с рабочей частотой 60 МГц в растворе в CCl_4 .



2.68 Определите строение молекулы соединения по заданной брутто-формуле и спектру ^1H ЯМР. Спектры сняты на приборе с рабочей частотой 60 МГц в растворе в CCl_4 .



3 Вопросы на установление последовательности.

3.1 Установите последовательность работы на спектрофотометре ПромЭколаб ПЭ-5400УФ:

- А Определение коэффициента пропускания и оптической плотности
- Б Вывод и обработка данных
- В Подготовка кюветы с исследуемым раствором
- Г Подготовка кюветы с раствором сравнения

4 Вопросы на установление соответствия.

4.1 Установите соответствие между дополнительными функциями программного обеспечения спектрофотометра ПромЭколаб ПЭ-5400УФ:

QA5400	программа количественного анализа. Она обеспечивает управление спектрофотометром, получение данных с прибора и дальнейшую их обработку
XL5x00	программа обеспечивает ввод результатов измерения со спектрофотометра в ячейки открытой книги Microsoft Excel™ при нажатии на приборе кнопки ПЕЧАТЬ/УДАЛИТЬ. Таким образом, пользователь может запрограммировать выполнение собственных алгоритмов обработки результатов измерений и форму их представления с помощью инструментария Excel
Kin5400	программа кинетического анализа. Измерение образца на одной заданной длине волны, с заданным периодом в течение заданного промежутка времени. Может быть установлена задержка начала измерения на определённое время. При задании параметров измерения, могут быть введены коэффициенты для пересчета оптической плотности в концентрацию
SC5400	программа, поставляемая по дополнительному заказу программа сканирования. Обеспечивает управление спектрофотометром, возможность сканирования оптической плотности или пропускания образцов по длинам волн в задаваемом диапазоне длин волн с задаваемым шагом сканирования, нахождение пиков на полученных спектрах, сохранение и загрузку таблицы пиков и таблицы результатов сканирования, а также печать протоколов сканирования. Программа защищена электронным ключом Guardant Sign, поставляемым в комплекте. Без использования ключа программа работает в режиме ограниченной функциональности (демонстрационный режим).

4.2 Установите соответствия между выполнением основных операций при нажатой кнопке Draw Normal:

А - Добавить связь в стандартном направлении	1 - щелкнуть по атому и, не отпуская клавишу мышки, передвинуть курсор в нужном направлении.
Б - Добавить связь в заданном направлении	2 - щелкнуть по связи
В - Нарисовать связь	3 - щелкнуть по атому

между имеющимися атомами	
Г - Изменить порядок связи	4 - щелкнуть по первому атому и, не отпуская клавишу мышки, тянуть связь ко второму атому






4.3 Сопоставьте:

А) Закон Авогадро	Тепловой эффект химической реакции, проводимой в изобарно-изотермических/изохорно-изотермических условиях, зависит только от вида и состояния исходных веществ и продуктов реакции и не зависит от пути протекания
Б) Закон Генри	В равных объемах различных газов, взятых при одинаковых температурах и давлениях, содержится одно и то же количество молекул
В) Закон Грэма	Закон об относительной скорости истечения различных газов через пористую поверхность при одинаковых условиях
Г) Закон Гесса	При постоянной температуре растворимость газа в данной жидкости прямо пропорционально давлению этого газа над раствором

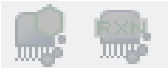



4.4 Проведите соответствие между программой и ее функцией

1 XDrawChem	А) программа для просмотра структуры молекул в трех измерениях;
2 Jmol	Б) создание и редактирование химических структур и оборудования;
3 Avogadro	В) графический молекулярный редактор;
4 ACD	Г) визуализатор для молекулярного моделирования.

4.5 Установите соответствие между элементами контрольной панели и их расшифровкой:

Элемент контрольной панели	Расшифровка
1. 	Е. Позволяет нарисовать особые химические символы (заряды ионов, значки радикалов и прочее);
2. 	Ж. Позволяет нарисовать различные электронные орбитали;
3. 	З. Отображает соответствие реакционных центров молекул. Поддерживаются только одностадийные реакции;
4. 	И. Создает цепь с указанным числом звеньев;
5. 	К. Включает режим рисования векторной графики. Сглаженной ломаной линии.

4.6 Установить соответствие между элементами главного меню и их расшифровкой

Элемент главного меню	Расшифровка
1. 	Д. Проверка выделенной молекулярной структуры на наличие ошибок;
2. 	Е. Проверка соответствия молекул обычным длинам связей и углам;
3. 	Ж. Подстрочный и надстрочный текст;
4. 	З. Запись в режиме "формулы" (автоматическая подстановка регистра под цифры (буквы)).

4.7 Установите соответствие:

Химики-информатики:

1. С. Трепалин
2. Ю. Черешник

3. А. Алексеенко

Вклад в развитие программы:

- А) создал ChemD;
- Б) создал электронный учебник по работе с программой на русском языке;
- В) сделал качественный перевод рекомендаций по выполнению лабораторных работ;

4.8 Установите соответствие:

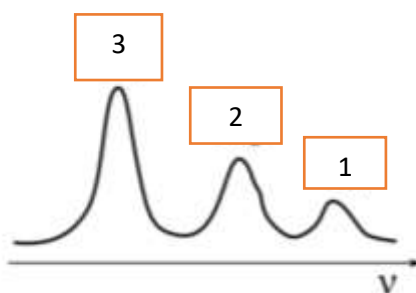
Команда:

- А) Introduction;
- Б) Procedure;
- в) Observation;

Выполняемое действие:

- 1) Отчет о наблюдении;
- 2) Введение к работе;
- 3) Порядок выполнения работы.

4.9 Соотнесите на спектре ядер ^1H этилового спирта (относительно низкое разрешение) фрагменты CH_3 , CH_2 , OH



1	А) CH_3
2	Б) CH_2
3	В) OH

Шкала оценивания результатов тестирования: в соответствии с действующей в университете балльно-рейтинговой системой оценивание результатов промежуточной аттестации обучающихся осуществляется в рамках 100-балльной шкалы, при этом максимальный балл по промежуточной аттестации обучающихся по очной форме обучения составляет 36 баллов, по очно-заочной и заочной формам обучения – 60 баллов (установлено положением П 02.016).

Максимальный балл за тестирование представляет собой разность двух чисел: максимального балла по промежуточной аттестации для данной формы обучения (36 или 60) СТУ 02.02.005–2021 и максимального балла за решение компетентностно-ориентированной задачи (6).

Балл, полученный обучающимся за тестирование, суммируется с баллом, выставленным ему за решение компетентностно-ориентированной задачи.

Общий балл по промежуточной аттестации суммируется с баллами, полученными обучающимся по результатам текущего контроля успеваемости в течение семестра; сумма баллов переводится в оценку по дихотомической шкале следующим образом (привести одну из двух нижеследующих таблиц):

Соответствие 100-балльной и дихотомической шкал

Сумма баллов по 100-балльной шкале	Оценка по дихотомической шкале
100-50	зачтено
49 и менее не зачтено	не зачтено

Критерии оценивания результатов тестирования: Каждый вопрос (задание) в тестовой форме оценивается по дихотомической шкале: выполнено – 2 балла, не выполнено – 0 баллов.

2.3 КОМПЕТЕНТНОСТНО-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ ЗАДАЧИ

1. С помощью программа Авогадро построить молекулу пептида аланил-аспарагин. Оптимизировать геометрию. Отцентровать всю конструкцию.

2. С помощью программа Авогадро нарисовать молекулу серной кислоты. Оптимизировать молекулярную геометрию, измерив – тепловой эффект образования одного моля вещества. Измерить расстояние l между 4 любыми атомами и двугранный угол θ между ними. Измерить угол η между тремя любыми атомами.

3. Используя возможности редактора VChem изобразить схемы следующих синтезов:

- Синтез Паала-Кнора;
- Реакция Зелинского
- Реакция Вильсмейера
- Реакция Фаворского
- Реакция Фриделя-Крафтса.

Все соединения назовите. Изобразите механизм подчеркнутой реакции. Примечание: в ходе выполнения работы, для изображения гетероциклических соединений, пользуйтесь шаблонами и функцией рисования от «звена к звену».

4. Создать модели сложной молекулы средствами программы AVOGADRO:

- Используя программу AVOGADRO нарисовать геометрию предложенной молекулы: пропановая кислота, бутановая кислота, пентановая кислота, гексановая кислота, гептановая кислота, октановая кислота, нонановая кислота, декановая кислота, 2-бутеновая кислота, 3-бутеновая кислота, муравьиная кислота, уксусная кислота, молочная кислота.

- Найдите оптимальную геометрию молекулы при помощи инструмента «оптимизация».

- Сохранить результат в виде файлов формата PDB и GZMAT (Z-матрица).

- Описать процесс кодирования молекулы (нарисовать на координатной плоскости XY структурную формулу и показать на ней нумерацию атомов и код присваиваемый каждому атому) на основе структуры и нумерации атомов предложенной пакетом AVOGADRO.

5. Используя программы Chemical WorkBench обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

6. Используя программы APPROX обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

7. Используя программы Kintecus, НВ обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

8. Используя программы MTDATA обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

9. Используя программы Thermo-Calc обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

10. Используя программы HSC Chemistry обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

11. Используя программы EQS4WIN обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

12 Используя программы Chemical ThermoChemical Calculator (TCC), Kintecus обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

13 Используя программы OLI, MTDATA обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

14 Используя программы ИВТАНТЕРМО, Thermo-Calc обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

15 С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и XL5x00 запрограммировать выполнение собственных алгоритмов обработки результатов измерений и форму их представления с помощью инструментария Excel при спектрофотометрическом определении ионов меди (II).

16 С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и Kin5400 вывести коэффициенты для пересчета оптической плотности в концентрацию при фотометрическом определении катионных красителей.

17 С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и SC5400 сканировать оптическую плотность или пропускание образцов по длинам волн в задаваемом диапазоне длин волн с задаваемым шагом сканирования, нахождение пиков на полученных спектрах, сохранить и загрузить таблицы пиков и таблицы результатов сканирования, а также напечатать протоколов сканирования при спектрофотометрическом определении ионов кобальта (II).

18 С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и XL5x00 запрограммировать выполнение собственных алгоритмов обработки результатов измерений и форму их представления с помощью инструментария Excel при спектрофотометрическом определении ионов железа (II, III) сульфосалицилатным методом.

19 С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и Kin5400 вывести коэффициенты для пересчета оптической плотности в концентрацию при фотометрическом определении прямых красителей.

20. С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и SC5400 сканировать оптическую плотность или пропускание образцов по длинам волн в задаваемом диапазоне длин волн с задаваемым шагом сканирования, нахождение пиков на полученных спектрах, сохранить и загрузить таблицы пиков и таблицы результатов сканирования, а также напечатать протоколов сканирования при спектрофотометрическом определении ионов хрома (III).

21. С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и XL5x00 запрограммировать выполнение собственных алгоритмов обработки результатов измерений и форму их представления с помощью инструментария Excel при спектрофотометрическом определении ионов меди (II).

22. С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и Kin5400 вывести коэффициенты для пересчета оптической плотности в концентрацию при фотометрическом определении кислотных красителей.

23. С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и SC5400 сканировать оптическую плотность или пропускание образцов по длинам волн в задаваемом диапазоне длин волн с задаваемым шагом сканирования, нахождение пиков на полученных спектрах, сохранить

и загрузить таблицы пиков и таблицы результатов сканирования, а также напечатать протоколов сканирования при спектрофотометрическом определении ионов кобальта (II).

24. С помощью программного обеспечения спектрофотометра ПЭ-5400УФ, а именно программы количественного анализа QA5400 и XL5x00 запрограммировать выполнение собственных алгоритмов обработки результатов измерений и форму их представления с помощью инструментария Excel при спектрофотометрическом определении ионов железа (II, III) сульфосалицилатным методом.

25. Используя программы THERBASE обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

26. Используя программы APPROX обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

27. Используя программы SEA обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

28. Используя программы AMMP обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

29. Используя программы Chemical WorkBench обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

30. Используя программы CHEMKIN обосновать целесообразность применения наиболее эффективной. Указать преимущества и недостатки используемых программ термодинамического моделирования.

Шкала оценивания решения компетентностно-ориентированной задачи: в соответствии с действующей в университете балльно-рейтинговой системой оценивание результатов промежуточной аттестации обучающихся осуществляется в рамках 100-балльной шкалы, при этом максимальный балл по промежуточной аттестации обучающихся по очной форме обучения составляет 36 баллов, по очно-заочной и заочной формам обучения – 60 (установлено положением П 02.016).

Максимальное количество баллов за решение компетентностно-ориентированной задачи – 6 баллов.

Балл, полученный обучающимся за решение компетентностно-ориентированной задачи, суммируется с баллом, выставленным ему по результатам тестирования.

Общий балл промежуточной аттестации суммируется с баллами, полученными обучающимся по результатам текущего контроля успеваемости в течение семестра; сумма баллов переводится в оценку по 5-балльной шкале следующим образом:

Соответствие 100-балльной и дихотомической шкал

Сумма баллов по 100-балльной шкале	Оценка по дихотомической шкале
100-50	зачтено
49 и менее не зачтено	не зачтено

Критерии оценивания решения компетентностно-ориентированной задачи:

6-5 баллов выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует глубокое понимание обучающимся предложенной проблемы и разностороннее ее рассмотрение; свободно конструируемая работа представляет собой логичное, ясное и при этом краткое, точное описание хода решения задачи (последовательности (или выполнения) необходимых трудовых действий) и формулировку доказанного, правильного вывода (ответа); при этом обучающимся предложено несколько вариантов

решения или оригинальное, нестандартное решение (или наиболее эффективное, или наиболее рациональное, или оптимальное, или единственно правильное решение); задача решена в установленное преподавателем время или с опережением времени.

4-3 балла выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует понимание обучающимся предложенной проблемы; задача решена типовым способом в установленное преподавателем время; имеют место общие фразы и (или) несущественные недочеты в описании хода решения и (или) вывода (ответа).

2-1 балла выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует поверхностное понимание обучающимся предложенной проблемы; осуществлена попытка шаблонного решения задачи, но при ее решении допущены ошибки и (или) превышено установленное преподавателем время.

0 баллов выставляется обучающемуся, если решение задачи демонстрирует непонимание обучающимся предложенной проблемы, и (или) значительное место занимают общие фразы и голословные рассуждения, и (или) задача не решена.