

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Б1.О.02.01 МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И  
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ  
Компьютерные технологии в химической науке и  
производстве  
наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.04.01 Химия

Направленность (профиль)

04.04.01.07 Физическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2022

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили \_\_\_\_\_

канд. хим. наук, Доцент, Маляр Юрий Николаевич

должность, инициалы, фамилия

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины

овладение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины

приобретение студентами знаний основных принципов формирования компьютерных сетей, построения научных и образовательных порталов, принципов формирования информационной научно-образовательной среды, а также навыков применения этих знаний для дальнейшей научной работы.

### 1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
<b>ОПК-1: Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</b>	
ОПК-1.1: Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук	
ОПК-1.2: Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук	
ОПК-1.3: Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	
<b>ОПК-3: Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности</b>	

ОПК-3.1: Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации	
химического профиля	
ОПК-3.2: Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	
ОПК-3.3: Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	

#### **1.4 Особенности реализации дисциплины**

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

## 2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад. час)	е
		1
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>1 (36)</b>	
занятия лекционного типа	0,5 (18)	
практические занятия	0,5 (18)	
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>2 (72)</b>	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

#### 3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
<b>1. Первый</b>									
	1. Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации. Принципы организации баз научных и справочных данных. Ознакомление с банком термодинамических данных NIST, рекомендациями ИЮПАК по значениям констант скорости простых реакций, информационными возможностями Chemweb.	2							
	2. Принципы организации баз научных и справочных данных			2					
	3. Рекомендации ИЮПАК по значениям констант скорости простых реакций			2					
	4. Компьютеризация измерительной аппаратуры. Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура.	2							
	5. Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура.			2					

6. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Использование пакета EXCEL, программных продуктов Maple, MathCad, Mathematica	2							
7. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей			2					
8. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений (строение, термодинамика и кинетика).	2							
9. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений			2					
<b>2. Второй</b>								
1. Современные основные программные продукты: термодинамика – CHET, Thermocalc, строение молекул – HyperChem, Dalton, Морас, Gamess, кинетика – KINET, Kintecus, Polyrate.	2							
2. Современные основные программные продукты: термодинамика – CHET, Thermocalc			2					
3. Современные основные программные продукты: строение молекул – HyperChem, Dalton, Морас, Gamess			2					
4. Основные принципы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и аварийных ситуаций. ASPEN, STOA.	2							
5. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований. Программные продукты EXCEL, Grapher, Origin. MS PowerPoint.	4							

6. Компьютерные технологии в обмене научной информацией (Интернет, электронная почта и электронные научные журналы). Компьютерные телеконференции.	2							
7. Электронные научные журналы. Компьютерные телеконференции.			4					
8. Работа с база данными научной информации							72	
Всего	18		18				72	



## **4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины**

### **4.1 Печатные и электронные издания:**

1. Платонов Д. В., Минаков А. В., Дектерев А. А. Компьютерные технологии в науке и образовании: учебно-методическое пособие [для бакалавров и магистров напр. 011200 «Физика», 140700 «Ядерная энергетика и теплофизика», 140800 «Ядерные физика и технологии», 222900 «Нанотехнология и микросистемная техника», 223200 «Техническая физика»](Красноярск: СФУ).

### **4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):**

1. Microsoft Office Professional Plus 2007.
2. Приложения ChemOffice Ultra 11 - пакет утилит для химиков, таких как: ChemDraw, Chem3D, ChemFinder, ChemACX

### **4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:**

1. Справочник по химии: основные понятия, термины, законы, схемы, формулы, справочный материал, графики / Л. Н. Блинов, И. Л. Перфилова; Санкт-Петербургский политехнический университет. - Москва: Проспект, 2010. - 155 с.
2. Электронно-библиотечная система Znanium.com предоставляет зарегистрированным пользователям круглосуточный доступ к электронным изданиям из любой точки мира посредством сети Интернет. – Режим доступа: <http://znanium.com>.

## **5 Фонд оценочных средств**

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

## **6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Для чтения лекций используется аудитория, оборудованная мультимедийным оборудованием. Практические занятия проводятся в учебной аудитории с использованием доски.