

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

Б1.О.02.01.07 МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

Компьютерные технологии в химической науке и
производстве

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

04.05.01.32 Аналитическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2022

Красноярск 2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

канд.хим.наук, доцент, Томилин Ф.Н.

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Целью изучения дисциплины является: овладение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации.

1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачей изучения дисциплины является: 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
ОПК-3: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	
ОПК-3.1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	
ОПК-3.2: Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности	
ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	
ОПК-4.1: Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности	
ОПК-4.2: Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик	

ОПК-4.3: Интерпретирует	
результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений	
ПК-5: Способен участвовать в разработке основных и дополнительных образовательных программ, разрабатывать отдельные их компоненты (в том числе с использованием ИКТ)	
ПК-5.1: Разрабатывает программы учебных дисциплин в соответствии с нормативно-правовыми актами в сфере образования	
ПК-5.2: Проектирует индивидуальные образовательные маршруты освоения программ учебных дисциплин в соответствии с образовательными потребностями обучающихся	
ПК-5.3: Осуществляет отбор педагогических и других технологий, в том числе информационно-коммуникационных, используемых при разработке основных и дополнительных образовательных программ и их элементов	

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
Контактная работа с преподавателем:	1,42 (51)	
занятия лекционного типа	0,47 (17)	
практические занятия	0,94 (34)	
Самостоятельная работа обучающихся:	0,58 (21)	
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
1. Компьютерная и математическая обработка данных									
	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. Использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации							4	
	3. Компьютеризация измерительной аппаратуры. Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура.	2							
	4. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Использование пакета EXCEL, программных продуктов Maple, MathCad, Mathematica	2							

5. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей.							4	
6. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений (строение, термодинамика и кинетика).	2							
7. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений							4	
8. Принципы организации баз научных и справочных данных			4					
9. Рекомендации ИЮПАК по значениям констант скорости простых реакций			4					
10. Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура.			4					
11. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей			4					
12. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений			6					
2. Компьютерные технологии в науке								
1. Современные основные программные продукты: термодинамика – CHET, Thermocalc, строение молекул – HyperChem, Dalton, Морас, Gamess, кинетика – KINET, Kintecus, Polyrate.	2							
2. Основные принципы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и аварийных ситуаций. ASPEN, STOA.	2							

3. Основные принципы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и аварийных ситуаций							4	
4. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований. Программные продукты EXCEL, Grapher, Origin. MS PowerPoint.	3							
5. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований							3	
6. Компьютерные технологии в обмене научной информацией (Интернет, электронная почта и электронные научные журналы). Компьютерные телеконференции	2							
7. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований							2	
8. Современные основные программные продукты: термодинамика – СНЕТ, Thermocalc			6					
9. Современные основные программные продукты: строение молекул – HyperChem, Dalton, Морас, Gamess			6					
10.								
Всего	17		34				21	

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).
2. Манзон Б. М. Maple V Power Edition: крат. рук.(Москва: Филинь).
3. Дьяконов В. П. MATLAB: учебный курс(Санкт-Петербург: Питер).
4. Дьяконов В.П. Системы символьной математики Mathematica 2, Mathematica 3(М.: СК-Пресс).
5. Дьяконов В. Mathematica 4:Учебный курс(СПб.: Питер).
6. Дьяконов В.П. MATHCAD 2001: Специальный справочник(СПб. [и др.]: Питер).
7. Дьяконов В. П., Усманов В. В. Maple 6: учебный курс(Москва: Питер).
8. Ивановский Р. И. Компьютерные технологии в науке и образовании. Практика применения систем MathCAD PRO: учебное пособие для вузов по направлению "Системный анализ и управление"(Москва: Высшая школа).
9. Сибирский федеральный университет [СФУ]. Центр технологий электронного обучения, Сибирский федеральный университет [СФУ]. Лаборатория по разработке мультимедийных электронных образовательных ресурсов Компьютерные технологии в науке и производстве. Презентационные материалы. Банк тестовых заданий в системе UniTest: электронные приложения к теоретическому курсу (Красноярск: Сибирский федеральный университет [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. Научная Электронная Библиотека e-LIBRARY.RU. Полнотекстовая коллекция «Российские академические журналы on-line» (издательство «Наука») включает 139 журналов. Заключено лицензионное соглашение (до ноября 2021 г.) об использовании ресурсов со свободным доступом с компьютеров университетской сети.- Режим доступа: <http://elibrary.ru/>.
2. Nature Publishing Group – годовая подписка на научные электронные журналы издательства Nature Publishing Group: Nature Materials, Nature Nanotechnology. – Режим доступа: <http://www.nature.com>.
3. EBSCO Journals (компания EBSCO Publishing) – электронные журналы. Всего более 7000 названий журналов, 3,5 тысячи рецензируемых журналов. – Режим доступа: <http://search.ebscohost.com>
4. Cambridge University Press - доступ к текущим выпускам журналов издательств Cambridge University Press (с 1996-2015 гг) . – Режим доступа: <http://www.journals.cambridge.org>
5. Royal Society of Chemistry - журналы открытого доступа. - Режим доступа: <http://pubs.rsc.org>.
6. Elsevier - доступ к Freedom Collection издательства Elsevier. В комплект подписки Freedom Collection издательства Elsevier входят электронные научные полнотекстовые журналы по всем областям науки, техники, медицины, размещенные на платформе ScienceDirect, (23 предметные коллекции), охват более 1900 названий журналов. Архив 2010-2014 гг. - Режим доступа: <http://www.sciencedirect.com>
7. Сайт по применению методов математической статистики и теории вероятностей в аналитической химии для обработки результатов аналитических измерений-Режим доступа: <http://chemstat.com.ru/>.
8. База данных термодинамических величин ИВТАНТЕРМО. -Режим доступа: <http://www.chem.msu.su/rus/handbook/ivtan/>
9. 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.
10. 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.