

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

Кафедра органической и
аналитической химии
(ОиАХ_ХМФ)

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий ОП ВО

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

Кафедра органической и
аналитической химии
(ОиАХ_ХМФ)

наименование кафедры

профессор Кузнецов Б.Н.

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ
КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В ХИМИЧЕСКОЙ НАУКЕ И
ПРОИЗВОДСТВЕ**

Дисциплина Б1.О.02.01 МАТЕМАТИЧЕСКИЙ И
ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫЙ ЦИКЛ
Компьютерные технологии в химической науке и
производстве

Направление подготовки / 04.04.01 Химия, магистерская программа
специальность 04.04.01.02 Аналитическая химия

Направленность
(профиль)

Форма обучения

очная

Год набора

2020

Красноярск 2021

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

Направление 04.04.01 Химия, магистерская программа 04.04.01.02

Аналитическая химия

Программу
составили

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

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
--

ОПК-3:Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

практика по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности

Практика по получению первичных профессиональных умений и навыков

Иностранный язык

научно-исследовательская работа

Научно-исследовательский семинар

преддипломная практика

1.5 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)	Семестр
		3
Общая трудоемкость дисциплины	3 (108)	3 (108)
Контактная работа с преподавателем:	1 (36)	1 (36)
занятия лекционного типа	0,5 (18)	0,5 (18)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	0,5 (18)	0,5 (18)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
Самостоятельная работа обучающихся:	2 (72)	2 (72)
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
Промежуточная аттестация (Зачёт)		

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Первый	8	10	0	0	
2	Второй	10	8	0	72	
Всего		18	18	0	72	

3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	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	0	0

2	1	Компьютеризация измерительной аппаратуры. Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура.	2	0	0
3	1	Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Использование пакета EXCEL, программных продуктов Maple, MathCad, Mathematica	2	0	0
4	1	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений (строение, термодинамика и кинетика).	2	0	0
5	2	Современные основные программные продукты: термодинамика – СНЕТ, Thermocalc, строение молекул – HyperChem, Dalton, Морас, Gamess, кинетика – KINET, Kintecus, Polyrate.	2	0	0
6	2	Основные принципы компьютерного моделирования химико-технологических процессов и аварийных ситуаций. ASPEN, STOA.	2	0	0

7	2	Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований. Программные продукты EXCEL, Grapher, Origin. MS PowerPoint.	4	0	0
8	2	Компьютерные технологии в обмене научной информацией (Интернет, электронная почта и электронные научные журналы). Компьютерные телеконференции.	2	0	0
Всего			18	0	0

3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в acad. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Принципы организации баз научных и справочных данных	2	0	0
2	1	Рекомендации ИЮПАК по значениям констант скорости простых реакций	2	0	0
3	1	Спектральная, адсорбционная и каталитическая аппаратура.	2	0	0
4	1	Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей	2	0	0
5	1	Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	2	0	0

6	2	Современные основные программные продукты: термодинамика – СНЕТ, Thermocalc	2	0	0
7	2	Современные основные программные продукты: строение молекул – HyperChem, Dalton, Морас, Gamess	2	0	0
8	2	Электронные научные журналы. Компьютерные телеконференции.	4	0	0
Всего			18	0	0

3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
Всего					

5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	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 «Ядерная физика и технологии», 222900 «Нанотехнология и микросистемная техника», 223200 «Техническая физика»]	Красноярск: СФУ, 2013

8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Учебные занятия по дисциплине проводятся в виде лекций, практических занятий и самостоятельной работы.

Лекции носят установочно-фундаментальный характер, направленный на изучение обучающимися соответствующей темы и содержат основные положения вопросов, составляющих сущность темы, содержат рекомендации по более глубокому самостоятельному изучению темы с помощью литературных источников. На лекциях ясно видна логическая связь изучаемой темы и смежных дисциплин.

На практических занятиях организовано обсуждение рассматриваемых тем с подготовкой презентаций.

Самостоятельная работа студентов предусматривает проработку и закрепление лекционного материала, самостоятельное изучение отдельных тем дисциплины; подготовка и защита презентации по выбору студентов.

9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

9.1 Перечень необходимого программного обеспечения

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

9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	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.
9.2.2	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 .

10 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.