

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Казанский национальный исследовательский
технологический университет»
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Д.Ш. Султанова

«07» июня 2021 г.



Рабочая программа дисциплины в виде электронного документа выгружена из информационной системы управления университетом и соответствует оригиналу
Простая электронная подпись, ID подписи: 1060
Подписал Проректор по учебной работе Д.Ш. Султанова
Дата 07.06.2021

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
по дисциплине «КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ»

| | |
|--------------------------|--|
| Направление подготовки: | 18.03.01 Химическая технология |
| Профиль: | Технология неорганических веществ |
| Квалификация выпускника: | Бакалавр |
| Форма обучения: | Заочная |
| Институт: | Институт нефти, химии и нанотехнологии |
| Факультет: | Факультет химических технологий |
| Кафедра-разработчик: | Кафедра «Технологии неорганических веществ и материалов» |
| Курс; семестр | 4-5; 12, 14 |

| Вид нагрузки | Часы | Зачётные единицы |
|--|------|------------------|
| Лекция | 6 | 0,17 |
| Лабораторная работа | 4 | 0,11 |
| Контроль самостоятельной работы | 10 | 0,28 |
| Самостоятельная работа | 84 | 2,33 |
| Форма аттестации: Зачет (14 сем), Контрольная работа (14 сем) | 4 | 0,11 |
| Всего | 108 | 3 |

Рабочая программа составлена с учётом требований Федерального государственного образовательного стандарта (приказ № 922 от 07.08.2020) по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология для профиля «Технология неорганических веществ» на основании учебных планов набора обучающихся 2021 года.

Разработчик программы:

Доцент

Л.Н. Нажарова

СОГЛАСОВАНО

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры «Технологии неорганических веществ и материалов», протокол от 04.06.2021 г. № 11.

Заведующий кафедрой *Согласовано* А.И. Хацринов

УТВЕРЖДЕНО

Начальник центра УМЦ

Утверждаю

Л.А. Китаева

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Компьютерная химия» являются:

- а) формирование знаний о компьютерных технологиях и программных продуктах для химической технологии
- б) получение навыков работы с программными продуктами на ПК.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерная химия» относится к формируемой участниками образовательных отношений части ООП и формирует у обучающихся по профилю «Технология неорганических веществ» набор знаний, умений, навыков и компетенций.

Для успешного освоения дисциплины «Компьютерная химия» обучающийся по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

1. Высшая математика
2. Информационные технологии
3. Моделирование химико-технологических процессов
4. Теоретические основы технологии неорганических веществ
5. Химическая технология неорганических веществ (часть 1)

Дисциплина «Компьютерная химия» является предшествующей и необходима для успешного освоения последующих дисциплин:

1. Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы
2. Производственная практика (преддипломная практика, в том числе научно-исследовательская работа)

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

ПК-4 Способен использовать знание свойств химических элементов, неорганических соединений и материалов на их основе, применять пакеты прикладных программ в технологии неорганических веществ

ПК-4.1. Знает фундаментальные принципы взаимосвязи между составом, строением, свойствами и реакционной способностью неорганических соединений

ПК-4.2. Умеет использовать теоретические основы неорганической технологии для решения задач профессиональной деятельности

ПК-4.3. Владеет навыками использования пакета прикладных программ в технологии неорганических веществ

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

Знать:

Основные законы, описывающие реакционную способность неорганических соединений.

Имеет базовые знания о современных компьютерных и информационных технологиях, прикладных программах для решения задач химической технологии

Уметь:

Использовать знания теоретических основ неорганической технологии для решения задач профессиональной деятельности.

Владеть:

Навыками работы с программными продуктами для ТНВ на персональных компьютерах

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

| № | Раздел | Семе- | Виды учебной работы (в часах) | Оценочные |
|---|--------|-------|-------------------------------|-----------|
|---|--------|-------|-------------------------------|-----------|

| п/п | дисциплины | стр | Лекция | Практические занятия | Лабораторные | КСР | СРС | средства для проведения текущей и промежуточной аттестации |
|-----|--|-----------|----------|----------------------|--------------|-----------|-----------|--|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
| 1. | Современное состояние компьютерной техники и компьютерных технологий | 12 | 2 | | | | 7 | Контрольная работа |
| | Итого по семестру | 12 | 2 | | | | 7 | |
| 1. | Программные продукты для химической технологии | 14 | 4 | | 4 | 10 | 77 | Контрольная работа; Лабораторная работа; Тест |
| | Итого по семестру | 14 | 4 | | 4 | 10 | 77 | Зачет, Контрольная работа |

5. Содержание лекционных занятий по темам

| № п/п | Раздел дисциплины | Часы | Тема лекционного занятия | Индикаторы достижения компетенции |
|-------|--|----------|---|-----------------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| 1. | Современное состояние компьютерной техники и компьютерных технологий | 2 | Установочная лекция. Цели и задачи дисциплины. Обзор современного уровня компьютерных технологий. | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| 2. | Программные продукты для химической технологии | 4 | Решение научных и прикладных задач химической технологии с применением программных продуктов. | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| | ВСЕГО | 6 | | |

6. Содержание практических/семинарских занятий

Проведение практических/семинарских занятий не предусмотрено учебным планом

7. Содержание лабораторных занятий

| № п/п | Раздел дисциплины | Часы | Тема занятия | Индикаторы достижения компетенции |
|-------|--|----------|---|-----------------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 6 |
| 1. | Программные продукты для химической технологии | 4 | Графическое построение и технологический расчет процесса ТНВ с применением УМП ChemCad. | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| | ВСЕГО | 4 | | |

8. Самостоятельная работа

| № п/п | Темы, выносимые на самостоятельную работу | Часы | Форма СРС | Индикаторы достижения компетенции |
|-------|---|------|---------------------------------|-----------------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 5 | 6 |
| 1. | Обзор современного уровня компьютерной техники, состояния | 7 | подготовка к контрольной работе | ПК-4.1 ПК-4.2 |

| № п/п | Темы, выносимые на самостоятельную работу | Часы | Форма СРС | Индикаторы достижения компетенции |
|-------|--|-----------|--|-----------------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 5 | 6 |
| | компьютерных технологий. Программные продукты. | | | ПК-4.3 |
| 2. | Табличные редакторы и их статистические возможности. | 20 | подготовка к контрольной работе, подготовка к лабораторной работе, подготовка к тестированию | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| 3. | Программные продукты для моделирования и проектирования ХТС | 37 | подготовка к контрольной работе, подготовка к лабораторной работе, подготовка к тестированию | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| 4. | Интернет, сети, социальные сети, электронные базы данных, поиск научной информации, ЭБС КНИТУ. | 20 | подготовка к контрольной работе, подготовка к тестированию | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| | ВСЕГО | 84 | | |

8.1 Контроль самостоятельной работы

| № п/п | Темы, выносимые на самостоятельную работу | Часы | Форма КСР | Индикаторы достижения компетенции |
|-------|---|-----------|---|-----------------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 5 | 6 |
| 1. | Табличные редакторы и их статистические возможности. | 2 | прием лабораторной работы, проверка контрольной работы, проверка тестирования | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| 2. | Программные продукты для моделирования и проектирования ХТС | 4 | прием лабораторной работы, проверка контрольной работы, проверка тестирования | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| 3. | Интернет, сети, социальные сети, электронные базы данных, поиск научной информации, ЭБС КНИТУ | 4 | проверка контрольной работы, проверка тестирования | ПК-4.1 ПК-4.2 ПК-4.3 |
| | ВСЕГО | 10 | | |

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний

При оценке результатов деятельности обучающихся в рамках дисциплины «Компьютерная химия» используется рейтинговая система. Максимальное и минимальное количество баллов по различным видам учебной работы описано в «Положении о балльно-рейтинговой системе оценки знаний студентов и обеспечения качества учебного процесса» ФГБОУ ВО КНИТУ.

Рейтинговая оценка формируется на основании текущего и промежуточного контроля. За контрольные точки студент может получить минимальное и максимальное количество баллов (см. таблицу).

| Оценочные средства | Кол-во | Мин.баллов | Макс.баллов |
|---------------------|--------|------------|-------------|
| 14-й семестр | | | |
| Лабораторная работа | 1 | 15 | 25 |
| Контрольная работа | 1 | 30 | 50 |
| Тест | 1 | 15 | 25 |
| Итого | | 60 | 100 |

10. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации и итоговой аттестации разрабатываются согласно положению о Фондах оценочных средств, рассматриваются как составная часть рабочей программы и оформляются отдельным документом.

11. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

11.1. Основная литература

При изучении дисциплины «Компьютерная химия» в качестве основных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

| Основные источники информации | Количество экземпляров |
|-------------------------------|------------------------|
|-------------------------------|------------------------|

| | |
|--|--|
| Ф.И. Воробьева, Е.С. Воробьев, Э.А. Каралин, Моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс] учеб. пособие : в 2-х ч.: Казань : Изд-во КНИТУ, 2019 | http://ft.kstu.ru/ft/Vorobev-Modelir_khim_tekhnol_prot_s_Ch2_planir_optim_eksperim.pdf Доступ с IP адресов КНИТУ |
| Ф.И. Карманов, В. А. Острейковский, Статистические методы обработки экспериментальных данных с использованием пакета MathCad [Прочее] Учебное пособие: Москва : ООО "КУРС"; Москва : ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2015 | http://znanium.com/go.php?id=508241 Режим доступа: по подписке КНИТУ |
| С. Г. Заварухин, Математическое моделирование химико-технологических процессов и аппаратов [Прочее] учебное пособие: Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2017 | http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=576798 Режим доступа: по подписке КНИТУ |

11.2. Дополнительная литература

В качестве дополнительных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

| Дополнительные источники информации | Количество экземпляров |
|--|---|
| Г.Г. Гарифзянова, Р.В. Цышевский, Г.М. Храпковский, Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций [Электронный ресурс] учебно-методическое пособие: Казань : КНИТУ, 2012 | http://ft.kstu.ru/ft/kvantovo-him_raschety.pdf Доступ с IP адресов КНИТУ |
| О. В. Прохорова, Информационная безопасность и защита информации [Электронный ресурс] Учебник: Самара : Самарский государственный архитектурно-строительный университет, ЭБС АСВ, 2014 | http://www.iprbookshop.ru/43183.html Режим доступа: по подписке КНИТУ |
| Е.К. Баранова, А.В. Бабаш, Информационная безопасность и защита информации [Прочее] Учебное пособие: Москва : Издательский Центр РИОР, 2020 | http://znanium.com/go.php?id=1114032 Режим доступа: по подписке КНИТУ |
| Н. Н. Зиятдинов, Н. Ю. Богула, Д. А. Рыжов [и др.], Системный анализ химико-технологических процессов с использованием программы ChemCad [Прочее] учебно-методическое пособие: Казань : Издательство КНИТУ, 2009 | http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=259071 Режим доступа: по подписке КНИТУ |

11.3. Электронные источники информации

При изучении дисциплины «Компьютерная химия» предусмотрено использование электронных источников информации:

1. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ: Режим доступа: <http://ruslan.kstu.ru/>
2. ЭБС «Лань»: Режим доступа: <https://e.lanbook.com>
3. ЭБС «Znanium.com»: Режим доступа: <http://znanium.com/>
4. ЭБС Университетская библиотека онлайн: Режим доступа: <http://biblioclub.ru/>
5. Научная электронная библиотека <https://elibrary.ru/>

11.4. Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Базы данных

Scopus Доступ свободный: www.scopus.com

Web of Science Доступ свободный: apps.webofknowledge.com

Информационные справочные системы

Справочно-правовая система «ГАРАНТ» Доступ свободный: www.garant.ru

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс» Доступ свободный: www.consultant.ru

12. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лицензированное программное обеспечение и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства, используемое в учебном процессе при освоении дисциплины «Компьютерная химия»:

Офисные и деловые программы: ABBYY FineReader 9.0 проф;

Офисные и деловые программы: MS Office 2007 Russian;

Офисные и деловые программы: MS Office 2007 Professional Russian;

Офисные и деловые программы: MS Office 2010-2016 Standard

Архиватор 7 Zip

Блокнот Notepad

Яндекс Браузер

МТО:

Учебные аудитории для проведения учебных занятий оснащены учебной мебелью: столы и стулья, а также

техническими средствами обучения:

презентационной техникой - проектор, экран, компьютер/ноутбук; ;

2.

Помещения для самостоятельной работы оснащены учебной мебелью и компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечены доступом в электронную информационную среду КНИТУ.

Лицензированное программное обеспечение и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства, используемое в учебном процессе при освоении дисциплины «Компьютерная химия»:

Категория ПО Наименование Лицензионный договор, соглашение

Офисные и деловые программы: ABBYY FineReader 9.0 проф от 19.11.2008 № AF90-3S1V01-102;

Офисные и деловые программы: MS Office 2007 Russian от 16.10.2008 лицензия № 44684779;

Офисные и деловые программы: MS Office 2007 Professional Russian от 16.10.2008 лицензия № 44684779;

Офисные и деловые программы: MS Office 2010-2016 Standard от 08.11.2016 № 16/2189/Б;

Дополнительное ПО доступное по бесплатной подписке от Microsoft

Офисные и деловые программы: Microsoft Office 365 Версия для студентов

ПО для коллективной работы Microsoft Teams

Научное ПО: Gaussian G09W Full Version от 22.12.2015 №15/2174/Б21.21э12.2015;

Научное ПО: Gaussian G16W Full Version 18/2143/Б от 01.10.2018;

Научное ПО: Gaussian G16l Full Version 18/2253/Б от 26.12.2018;

Научное ПО: GaussView 6.0.16W 18/2252/Б от 26.12.2018;

Научное ПО: Mathcad Education

Научное ПО: Mathematica Standard

Научное ПО: Aspen HYSYS (ANSYS Academic Research Mechanical and CFD; ANSYS LS-DYNA; ANSYS LS-DYNA HPC-8)

Научное ПО: MATLAB Academic (в комплекте с Simulink Academic)

ПО имеющее лимит по сроку использования (закупленное ВУЗом)

САПР: САПР CAD Assyst System

САПР: КОМПАС-3D LT v12

13. Образовательные технологии

В процессе освоения дисциплины «Компьютерная химия» используются следующие образовательные технологии:

Количество часов занятий, проводимых в интерактивных формах в учебном процессе составляет 22 часов. В качестве образовательных технологий могут быть использованы:

- работа в малых группах;
- дискуссия;
- дистанционное обучение;