

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический
университет»
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР
А.В.Бурмистров
 « 14 » 11 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

По дисциплине Б1.В.ДВ.9.1 «Компьютерная химия»

Направление подготовки 18.03.01 – «Химическая технология»
Профиль подготовки «Технология неорганических веществ»
«Технология тугоплавких неметаллических
и силикатных материалов»

Квалификация выпускника БАКАЛАВР

Форма обучения ОЧНАЯ
Институт, факультет Нефти, химии и нанотехнологий, химических
технологий

Кафедра-разработчик рабочей программы Технология неорганических веществ
и материалов

Курс 4, семестр 7

	Часы	Зачетные единицы
Лекции	18	
Практические занятия		
Семинарские занятия		
Лабораторные занятия	36	
Самостоятельная работа	54	
Форма аттестации		
Всего	108	3

Казань, 2017 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования 1005 от 11.08.2016 по направлению 18.03.01 «Химическая технология» для профилей «Технология неорганических веществ» и «Технология тугоплавких неметаллических и силикатных материалов» на основании учебного плана 2017 года набора обучающихся.

Разработчик программы

Доцент каф. ТНВМ



Назарова Л.Н.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Технологии неорганических веществ и материалов протокол от 13.11 2017г. № 5.

Зав. кафедрой



Хазринов А.И.

УТВЕРЖДЕНО

Протокол заседания методической комиссии факультета Химических технологий от 16.11 2017 г. № 3

Председатель комиссии, доцент



Виноградова С.С.

Начальник УМЦ



Китаева Л.А.

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 (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Компьютерная химия» относится к вариативной; дисциплины по выбору ООП и формирует у бакалавров по направлению подготовки «Химическая технология» набор знаний, умений, навыков и компетенций, необходимых для выполнения производственно-технологической и научно-исследовательской деятельности.

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

- а) Б1.Б.6 Математика.
- б) Б1.Б.7 Информатика.
- в) Б1.Б.10 Общая и неорганическая химия.
- г) Б1.Б.19 Общая химическая технология.
- д) Б1.В.ОД.2 Вычислительная математика.

Знания, полученные при изучении дисциплины «Компьютерная химия» могут быть использованы при прохождении преддипломной практики и выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

ОПК–1 способностью и готовностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности;

ПК–2 готовностью применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования;

ПК–16 способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1. Знать

а) возможности современных компьютерных технологий;
б) области применения пакетов прикладных программ в химической технологии;

в) основные принципы работы на ПК с табличными и текстовыми редакторами, а также программами пакетами (ChemCad, GAUSSIAN и др).

2) Уметь:

а) работать с формулами, таблицами и диаграммами в программе Excel;
б) работать в режиме графического построения в программе ChemCad;
в) работать в режиме моделирования в программе ChemCad.
г) использовать сетевые компьютерные технологии в профессиональной деятельности

3) Владеть:

а) знаниями о программных средствах обработки информации;
б) навыками работы с программными продуктами на персональных компьютерах.

Структура и содержание дисциплины «Компьютерная химия»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы (в часах)				Информационные и другие образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса	Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лекции	Семинар (Практические занятия)	Лабораторные работы	СРС		
1	Современное состояние компьютерной техники и компьютерных технологий	7	2	-		10		Реферат
2	Программные продукты для химической технологии. УМП для химической технологии	7	2	-	6	14	Программа EXCEL УМП ChemCad	Контрольная работа Сдача лабораторных работ Тест
3	Исследование и проектирование химико-технологических процессов и аппаратов с применением УМП	7	10	-	27	15	УМП ChemCad	Контрольная работа Сдача лабораторных работ Тест
4	Обзор пакетов прикладных программ для расчета свойств и состояний молекул	7	2	-		10		Реферат
5	Информационные сети и системы	7	2		3	5		Реферат
	Итого		18		36	54		108
Форма аттестации								Зачет

5. Содержание лекционных занятий по темам

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Формируемые компетенции
1	Современное состояния компьютерной техники и компьютерных технологий	2	Обзор современного уровня компьютерной техники и состояния компьютерных технологий. Программные продукты.	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
2	Программные продукты для химической технологии. УМП для химической технологии	2	Текстовые, графические, табличные редакторы, их возможности и применения для решения научных и прикладных задач химической технологии. Универсальные моделирующие программы	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
3	Исследование и проектирование химико-технологических процессов и аппаратов с применением УМП	10	Программа ChemCad. Проектирование химико-технологических процессов с применением программы ChemCad.	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
4	Обзор пакетов прикладных программ для расчета свойств и состояний молекул.	2	Обзор возможностей прикладных программ для расчета молекул и химических реакций. квантово-химических расчетов молекул	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
5	Информационные сети и системы	2	Информация в современном мире, способы ее распространения и защиты. Электронные базы данных.	ПК-2

Содержание лекций по дисциплине

Обзор современного уровня и состояния компьютерной техники и компьютерных технологий. Программные продукты.

Универсальные моделирующие программы, используемые в химической технологии. Структура УМП, задачи решаемые с применением УМП, проблемы и перспективы их развития.

Основные возможности табличного редактора MicrosoftExcel. Работа с формулами, таблицами, диаграммами, статистическая обработка данных. Обзор графических программ (AutoCad, КОМПАС), SolidWorks- программный комплекс САПР и др.

Исследование и проектирование химико-технологических процессов с применением программы ChemCad. Основные сведения о программе, ее возможности. Требования программы, загрузка системы, режимы работы системы, структура окна, начало и завершение работы. Режим графического построения. Основные возможности программы для построения графических схем химико-технологических процессов. Режим моделирования технологического процесса.

Решение задач расчета материального баланса разделения смеси, баланса абсорбции, расчет кинетических параметров реактора с применением пакета ChemCad.

Основные понятия теории электронного строения молекул. Обзор пакетов расчетов свойств и состояний молекул и химических реакций.

Современные информационные технологии. Электронные базы данных. Информационные сети, интернет. Способы и формы распространения информации. Защита информации в компьютерных сетях.

6. Содержание практических/семинарских занятий (не предусмотрены рабочим планом)

7. Содержание лабораторных занятий

Цель проведения лабораторных занятий – развить навыки использования современных информационных технологий, компьютерных технологий и прикладных программных средств для решения задач химической технологии.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Наименование лабораторной работы	Формируемые компетенции
1	Программные продукты для химической технологии. УМП для химической технологии	6	1. Табличный редактор Excel. Работа с текстом, построение таблиц, обработка табличных данных, расчеты, построение диаграмм.(3 часа) 2. Контрольная работа Оформление и Обработка экспериментальных данных в Microsoft Excel(3 часа)	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
2	Исследование и проектирование химико-технологических процессов и аппаратов с применением УМП	27	1. Изучение графических возможностей программы ChemCad. (3 часа) 2. Построение технологических схем в программе ChemCad.(6 часов) 3. Расчет материального баланса разделения смеси газов.(4 часов) 4. Расчет материального баланса абсорбции газов.(4 часа).	ОПК-1, ПК-2, ПК-16

			5.Определение кинетических параметров реакции в аппарате периодического действия. (6 часов) 6. Контрольная работа по УМП СС.(4часа).	
3	Информационные сети и системы	3	Интернет, сети, социальные сети, электронные базы данных, ЭБС КНИТУ.	ОПК-1, ПК-2, ПК-16

Все лабораторные работы проводятся в компьютерном классе с использованием ПК.

8. Самостоятельная работа бакалавра

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Формируемые компетенции
1	История возникновения и развития компьютерных технологий	6	Написание реферата	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
2	Статистические возможности табличного редактора MicrosoftExcel	8	Подготовка к лабораторным работам Подготовка к выполнению тестового задания по материалам лекционного и лабораторного курса	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
3	Обработка данных в программе MicrosoftExcel	12	Подготовка к выполнению и защите лабораторных работ в программе MicrosoftExcel Подготовка к выполнению контрольной работы по работе в программе MicrosoftExcel Подготовка к выполнению тестового задания по материалам лекционного и лабораторного курса	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
4	Программные продукты для моделирования гидродинамики процессов.	8	Самостоятельная проработка темы, подготовка реферата	ОПК-1, ПК-2, ПК-16
5	Моделирование процесса в УМП ChemCad	14	Подготовка к выполнению и защите лабораторных работ в программе ChemCad Подготовка к выполнению контрольной работы по	ОПК-1, ПК-2, ПК-16

			работе в программе ChemCad Подготовка к выполнению тестового задания по материалам лекционного и лабораторного курса	
6	Защита информации в компьютерных сетях	6	Самостоятельная проработка тем, подготовка реферата	ОПК-1, ПК-2, ПК-16

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний.

При оценке результатов деятельности обучающихся в рамках дисциплины Компьютерная химия используется рейтинговая система. Рейтинговая оценка формируется на основании текущего и промежуточного контроля. Максимальное и минимальное количество баллов по различным видам учебной работы описано в положении о рейтинговой системе.

Максимальный рейтинг бакалавра по дисциплине $R_{\text{дис}}$ равен 100 баллам и определяется в общем случае по формуле:

$$R_{\text{дис}} = R_{\text{тек}} + R_{\text{экз}},$$

где $R_{\text{тек}}$ – балл за текущую работу студента в течение семестра; $R_{\text{экз}}$ – балл, полученный студентом при сдаче экзамена. Обучение по дисциплине компьютерная химия завершается зачетом, и рейтинг студента будет складываться только из $R_{\text{тек}}$. Текущий контроль отражает степень усвоения дисциплины за семестр.

Объем и уровень усвоения студентами учебного материала дисциплины «Компьютерная химия» оцениваются комплексной рейтинговой оценкой, включающей в себя:

$$R_{\text{тек}} = R_{\text{пром}} + H + K,$$

- **результаты промежуточного контроля ($R_{\text{пром}}$)** - оценка теоретических знаний, практических умений и навыков, проявленных студентами на всех формах занятий в период освоения дисциплины. Рейтинг $R_{\text{пром}}$ определяется как сумма баллов полученных за все лабораторные работы.

- **результаты контрольных испытания (K)** к которым в данном случае относятся контрольные работы, тест и реферат.

- **выполнение нетиповых заданий повышенной сложности (H)**: участие в олимпиадах, научно-исследовательской работе кафедры, или выполнение других работ, углубляющих знания по данной дисциплине. За выполнение таких заданий (которые не являются обязательными, и выполняются только по желанию) могут начисляться дополнительные (премиальные) аттестационные баллы. Согласно положению премиальные баллы не должны превышать 40 баллов. Выдача нетиповых заданий студентам осуществляется в начале изучения дисциплины. Зачет работ производится на последней неделе после всех запланированных аттестационных работ.

При изучении дисциплины компьютерная химия предусмотрено выполнение 7 лабораторных работ, 2 контрольных работ, подготовка 1 реферата и выполнение тестового задания по материалам лекционного и лабораторного курса.

За эти контрольные точки студент может получить минимальное и максимальное количество баллов (см. таблицу).

Таблица. Распределение баллов по основным формам работы бакалавра.

Оценочные средства	Минимум баллов	Максимум баллов
Лабораторная работа 1	3	6
Лабораторная работа 2	3	6
Лабораторная работа 3	4	8
Лабораторная работа 4	4	8
Лабораторная работа 5	4	8
Лабораторная работа 6	5	10
Лабораторная работа 7	3	6
Контрольная работа №1	6	10
Контрольная работа №2	10	15
Тест	12	19
Реферат	6	10
Итого	60	100

В ходе изучения дисциплины Компьютерная химия возможно *по желанию студента* выполнение нетиповых индивидуальных заданий. Содержание заданий может быть связано с научно-исследовательской работой студента, выполнением проектных работ (или др. видов работ) и заключаться, например, в обработке собственных экспериментальных данных, построении схем лабораторных установок, построении технологических схем, освоении режима моделирования какого-либо аппарата (дробилки, мельницы, печи и др.) в программе ChemChad или SolidWorks, выполнении квантово-химических расчетов и других заданий. Задания могут выдаваться преподавателем, ведущим занятия по дисциплине Компьютерная химия, или научным руководителем курсовых и дипломных работ бакалавра. Указанные индивидуальные, творческие задания выполненные студентами оцениваются в диапазоне от 0 до 30 баллов и суммируются с итоговой рейтинговой оценкой по дисциплине.

Итоговая контрольная точка по дисциплине Компьютерная химия – зачёт.

Предмет считается усвоенным и проставляется отметка о зачете, если студентом выполнены все текущие контрольные точки и сумма баллов, набранных за текущую работу в семестре, не менее 60.

Таблица – Оценки успеваемости по дисциплине

Интервал баллов рейтинга	Оценка
$0 \leq R_{\text{дис}} < 60$	Незачет
$60 \leq R_{\text{дис}} \leq 100$	Зачет

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

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся и итоговой (государственной 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	Кол-во экз.
1. Зиятдинов, Н. Н. Системный анализ химико-технологических процессов с использованием программы CHEMCAD [Учебники] : учеб.-метод. пособие / Казан. гос. технол. ун-т. — Казань, 2009. — 212 с. ISBN 978-5-7882-0806-0.	160 экз. в УНИЦ КНИТУ ЭБС Лань https://e.lanbook.com/book/13329 . Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
2. Козлов А. Ю. Статистический анализ данных в MS Excel : учеб. пособие / А.Ю. Козлов, В.С. Мхитарян, В.Ф. Шишов. — М. : ИНФРА-М, 2017.	ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=858510 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ

В качестве дополнительных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

Дополнительные источники информации	Кол-во экз.
1. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. [Электронный ресурс] : моногр. — Электрон. дан. — М. : СОЛОН-Пресс, 2011. — 224 с.	ЭБС Лань http://e.lanbook.com/book/13803 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
2. Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad /Учебно-методическое пособие/ Казан.гос.технол.ун-т. Сост.:Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В, Рыжов Д.А., Казань, 2008. -159с.	ЭБС Лань http://e.lanbook.com//book/13290 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
3. Компьютерная графика. КОМПАС и AutoCAD: Учебное пособие / Конакова И.П., Пирогова И.И., - 2-е изд., стер. - М.:Флинта, Изд-во Урал. ун-та, 2017. - 146 с.	ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?item=tbknov&code=5&page=6 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
4 Интернет-технологии : учеб. пособие / С.Р. Гуриков. — М. : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2017. — 184 с	ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=908584 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
5. Нарышкин Д. Г. Химическая термодинамика с Mathcad. Расчетные задачи: Учебное пособие / Д.Г. Нарышкин.	ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=503896 Доступен из любой точки

- М.: ИЦ РИОР, НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 199 с.: ISBN 978-5-369-01479-0	интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
--	---

М.: ИЦ РИОР, НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 199 с.: ISBN 978-5-369-01479-0	Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
6. Острейковский В. А. Статистические методы обработки экспериментальных данных с использованием пакета MathCad: Учебное пособие / Ф. И. Карманов, В. А. Острейковский - М.: КУРС, НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 208 с. ISBN 978-5-905554-96-4	ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=508241 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ
7. Информационная безопасность и защита информации: Учебное пособие. / Баранова Е.К., Бабаш А.В. — 3-е изд., перераб. и доп. — М.: РИОР: ИНФРА-М, 2017. — 322 с	ЭБС «Znanium» http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=763644 Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ

10.3 Электронные источники информации

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

1. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ. - Режим доступа: <http://ruslan.kstu.ru>
2. Электронная библиотека УНИЦ КНИТУ. - Режим доступа: <http://ft.kstu.ru>
3. ЭБС Znanium.com. - Режим доступа: <http://znanium.com>
4. ЭБС Лань. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com>
5. Электронный журнал научно-исследовательского института «Центрпрограммсистем»

Согласовано:
Зав. сектором ОКУФ



12. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля).

1. Лекционные занятия:

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

2. Лабораторные занятия:

Рабочие места преподавателя, и студентов оснащенные компьютером с доступом в Интернет.

13. Образовательные технологии

Количество часов лекционных занятий, проводимых в интерактивной форме - 9ч, лабораторных занятий – 36ч.

Доля лекционных занятий, проводимых в интерактивной форме, составляет 50%, доля лабораторных занятий – 100%.

В качестве интерактивных форм проведения лекционных занятий используется:

Лекция-визуализация Лекции по темам работы программы ChemCad в графическом режиме и режиме моделирования проводятся с применением рисунков и схем используемых в ходе изложения материалов.

Лекция –диалог В ходе лекций по темам «Информационные сети и системы», «Обзор пакетов прикладных программ для расчета свойств и состояний молекул» аудитория отвечает на вопросы требующие знаний изученных дисциплин, общего кругозора и помогающие раскрытию содержания излагаемого материала

В качестве интерактивных форм всех лабораторных занятий используется *работа на ЭВМ с программными продуктами* для решения задач согласно учебного плана

работа в малой группе для совместного решения в команде поставленной задачи.

Лист переутверждения рабочей программы

Рабочая программа по дисциплине «Компьютерная химия» пересмотрена на заседании кафедры Технологии неорганических веществ и материалов

п/п	Дата переутверждения РП (протокол заседания кафедры № _____ от _____. ____ 20__)	Наличие изменений	Наличие изменений в списке литературы	Подпись разработчика РП	Подпись заведующего кафедрой	Подпись начальника УМЦ
	Протокол заседания кафедры № 1 от 04.09. 2018	Нет	Нет			