

**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение**  
**высшего образования**  
**«Нижегородский государственный технический университет**  
**им. Р.Е. Алексеева» (НГТУ)**

**Дзержинский политехнический институт (филиал)**

УТВЕРЖДАЮ:

Директор института:

\_\_\_\_\_ А.М. Петровский

“05 ” мая 2023г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Б1.В.ДВ.3.1 Компьютерные методы в химических исследованиях**  
(индекс и наименование дисциплины по учебному плану)  
для подготовки магистров

Направление подготовки: 18.04.01 Химическая технология

Направленность (программа): Химия и технология продуктов основного органического и нефтехимического синтеза

Форма обучения: очная, очно-заочная

Год начала подготовки 2023

Выпускающая кафедра      Химические и пищевые технологии

Кафедра-разработчик      Химические и пищевые технологии

Объем дисциплины            180/5  
    часа/з.е

Промежуточная аттестация    зачет, зачет с оценкой

Разработчик: к.х.н., доцент Орехов Д.В.

Дзержинск, 2023



Рабочая программа дисциплины: разработана в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования (ФГОС ВО 3++) по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология, утвержденного приказом МИНОБРНАУКИ РОССИИ от 07 августа 2020 года № 910 на основании учебного плана, принятого УС ДПИ НГТУ

протокол от 28.04.2023 №8

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры-разработчика РПД Химические и пищевые технологии  
протокол от 05.05.2023 № 10

Зав. кафедрой д.х.н, профессор \_\_\_\_\_ О.А. Казанцев  
(подпись)

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий выпускающей кафедрой Химические и пищевые технологии

Зав. кафедрой д.х.н, профессор \_\_\_\_\_ О.А. Казанцев  
(подпись)

Начальник ОУМБО \_\_\_\_\_ И.В. Старикова  
(подпись)

Рабочая программа зарегистрирована в ОУМБО: № 18.04.01 - 21

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Цели и задачи освоения дисциплины .....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	4
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) .....	4
4. Структура и содержание дисциплины.....	6
5. Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины.....	12
6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины.....	14
7. Информационное обеспечение дисциплины.....	14
8. Образовательные ресурсы для инвалидов и лиц с ОВЗ.....	15
9. Материально-техническое обеспечение, необходимое для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	16
10. Методические рекомендации обучающимся по освоению дисциплины.....	17
11. Оценочные средства для контроля освоения дисциплины.....	19

## 1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**1.1. Целью освоения дисциплины является** формирование теоретических знаний и практических навыков использования компьютерных технологий в научной-исследовательской и проектной деятельности.

**1.2. Задачи освоения дисциплины:** постановка и формулирование задач обработки и анализа научно-технической информации и результатов научных экспериментов на основе современных компьютерных технологий; создание компьютерных теоретических моделей технологических процессов, позволяющих прогнозировать и оптимизировать технологические параметры и характеристики аппаратуры.

## 2 МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Учебная дисциплина «Компьютерные методы в химических исследованиях» включена в перечень вариативной части дисциплин (формируемой участниками образовательных отношений) по выбору (запросу обучающихся), направленный на углубление уровня освоения компетенций. Дисциплина реализуется в соответствии с требованиями ФГОС, ОП ВО и УП, по данному направлению подготовки.

Дисциплина базируется на следующих дисциплинах: Информатика, Моделирование химико-технологических процессов программы бакалавриата.

Дисциплина «Компьютерные методы в химических исследованиях» является основополагающей для изучения следующих дисциплин: «Поиск и обработка научно-технической информации».

Рабочая программа дисциплины «Компьютерные методы в химических исследованиях» для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья разрабатывается индивидуально с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья таких обучающихся, по их личному заявлению.

## 3 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Таблица 1

Формирование компетенций ПК-2 дисциплинами

Код компетенции	Названия учебных дисциплин, модулей, практик, участвующих в формировании компетенции вместе с данной дисциплиной	Курсы/семестры обучения			
		1 курс семестр		2 курс семестр	
		1	2	3	4
ПК-2	Химия полимеров		+		
	Физика полимеров		+		
	Новые материалы и нанотехнологии			+	
	Нормы и стандарты в химической промышленности				+
	Компьютерные методы в химических исследованиях	+	+		
	Компьютерные методы в проектировании химических производств	+	+		
	Поиск и обработка научной информации			+	
	Технология тонкого органического синтеза			+	
	Научно-исследовательская работа	+	+	+	
	Научно-исследовательская работа				+
	Преддипломная практика				+*
Выполнение, подготовка к процедуре защиты и защита ВКР				+*	

\* пятый семестр для очно-заочной формы обучения

ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫХ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОП

Таблица 2

**Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения**

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине			Оценочные средства	
					Текущего контроля	Промежуточной аттестации
ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации, выбору методик и средств решения задач, анализировать и обеспечивать своевременную актуализацию и верификацию документов	ИПК-2.5. Разрабатывает планы и программы проведения научных исследований и технических разработок	<b>Знать:</b> возможности и методики использования тех или иных программ для решения задач в химических исследованиях	<b>Уметь:</b> применять современные разработки программного обеспечения и выбирать методы решения задач в химических исследованиях	<b>Владеть:</b> унифицированными программными средствами моделирования химических исследований	Выполнение задания для самостоятельной работы	Вопросы для устного собеседования: 10 вопросов

## 4 СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 4.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ по семестрам

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зач.ед./180 часов, распределение часов по видам работ представлено в табл. 3 и 4.

Формат изучения дисциплины: с использованием элементов электронного обучения.

Таблица 3

**Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ для очной формы обучения**

Вид учебной работы	Всего часов	Семестр (курс)	Семестр (курс)
		1 (1)	2 (1)
<b>1. Контактная работа обучающихся с преподавателем</b> (по видам учебных занятий) (всего), в том числе:	89		
<b>1.1. Аудиторные занятия (всего), в том числе:</b>			
- лекции (Л)	17	17	
- лабораторные работы (ЛР)			
- практические занятия (ПЗ)	68	34	34
- практикумы (П)			
<b>1.2. Внеаудиторные занятия (всего), в том числе:</b>	4	2	2
- групповые консультации по дисциплине	4	2	2
- групповые консультации по промежуточной аттестации (экзамен)			
- индивидуальная работа преподавателя с обучающимся:			
- по проектированию: проект (работа)			
- по выполнению РГР			
- по выполнению КР			
- по составлению реферата (доклада, эссе)			
<b>2. Самостоятельная работа студента (СРС) (всего)</b>	91	55	36
<b>Вид промежуточной аттестации зачет, зачет с оценкой</b>	зачет, зачет с оценкой	зачет	зачет с оценкой
<b>Общая трудоемкость, часы/зачетные единицы</b>	180/5	108/3	72/2

Таблица 4

**Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ для очно-заочной формы обучения**

Вид учебной работы	Всего часов	Семестр (курс)	Семестр (курс)
		1 (1)	2 (1)
<b>1. Контактная работа обучающихся с преподавателем</b> (по видам учебных занятий) (всего), в том числе:	68		
<b>1.1. Аудиторные занятия (всего), в том числе:</b>			
- лекции (Л)	17	17	
- лабораторные работы (ЛР)			
- практические занятия (ПЗ)	51	17	34
- практикумы (П)			
<b>1.2. Внеаудиторные занятия (всего), в том числе:</b>	4	2	2
- групповые консультации по дисциплине	4	2	2
- групповые консультации по промежуточной аттестации (экзамен)			
- индивидуальная работа преподавателя с обучающимся: - по проектированию: проект (работа) - по выполнению РГР - по выполнению КР - по составлению реферата (доклада, эссе			
<b>2. Самостоятельная работа студента (СРС) (всего)</b>	108	72	36
<b>Вид промежуточной аттестации зачет, зачет с оценкой</b>	зачет, зачет с оценко й	зачет	зачет с оценкой
<b>Общая трудоемкость, часы/зачетные единицы</b>	180/5	108/3	72/2



#### 4.2. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Содержание дисциплины, структурированное по темам, приведено в таблице 5 и 5а.

Таблица 5

#### Содержание дисциплины, структурированное по темам, для студентов очной формы обучения

Планируемые (контролируемые) результаты освоения: код УК; ОПК; ПК и индикаторы достижения компетенций	Наименование тем	Виды учебной работы				Вид СРС	Наименование используемых активных и интерактивных образовательных технологий	Реализация в рамках практической подготовки (трудоемкость в часах)	Наименование разработанного электронного курса (трудоемкость в часах)
		Контактная работа			Самостоятельная работа				
		Лекции, час	Лабораторные работы, час	Практические занятия, час					
<b>1 семестр (очная форма обучения)</b>									
ПК-2 ИПК-2.5	<b>Тема 1.</b> Программы и другие электронные продукты для решения задач в области химии и химической технологии	2		0	4	Подготовка к лекциям и практическим занятиям, тестированию. 6.1.3: С. 5-49			
	<b>Тема 2.1.</b> Химические редакторы. Принципы графического изображения химических формул в органической химии.	2		4	6	Подготовка к лекциям и практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.3: С. 50-83			
	<b>Тема 2.2.</b> Химические редакторы. Современные пакеты программ для изображения химических формул и уравнений реакций.	2		4	6				
	<b>Тема 3.1.</b> Базы данных и электронные библиотеки по химии	2		4	4	Подготовка к лекциям и практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной			
	<b>Тема 3.2.</b> Системы управления библиографическими базами данных	2		4	6				

Планируемые (контролируемые) результаты освоения: код УК; ОПК; ПК и индикаторы достижения компетенций	Наименование тем	Виды учебной работы				Вид СРС	Наименование используемых активных и интерактивных образовательных технологий	Реализация в рамках практической подготовки (трудоемкость в часах)	Наименование разработанного электронного курса (трудоемкость в часах)
		Контактная работа			Самостоятельная работа				
		Лекции, час	Лабораторные работы, час	Практические занятия, час					
						работы. 6.1.2: С. 18-36			
	<b>Тема 4.1.</b> Компьютерная обработка экспериментальных данных	2		8	10	Подготовка к лекциям и практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.4: С. 11-65			
	<b>Тема 4.2.</b> Программы обработки и визуализации данных	2	-	8	15				
	<b>Тема 5.1.</b> Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	3		2	4	Подготовка к практическим занятиям, тестированию.			
<b>2 семестр (очная форма обучения)</b>									
	<b>Тема 5.2.</b> Изучение свойств молекул при помощи методов компьютерной химии. Неэмпирические и эмпирические методы расчета строения молекул			14	18	Подготовка к практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.5: 347-362; 391-407			
	<b>Тема 5.3.</b> Моделирование с использованием пакетов компьютерной математики			20	18	Подготовка к практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.1: 132-160			
	<b>ИТОГО по дисциплине</b>	<b>17</b>		<b>68</b>	<b>91</b>				

Таблица 5а

## Содержание дисциплины, структурированное по темам, для студентов очно-заочной формы обучения

Планируемые (контролируемые) результаты освоения: код УК; ОПК; ПК и индикаторы достижения компетенций	Наименование тем	Виды учебной работы				Вид СРС	Наименование используемых активных и интерактивных образовательных технологий	Реализация в рамках практической подготовки (трудоемкость в часах)	Наименование разработанного электронного курса (трудоемкость в часах)
		Контактная работа			Самостоятельная работа				
		Лекции, час	Лабораторные работы, час	Практические занятия, час					
<b>1 семестр (очно-заочная форма обучение)</b>									
ПК-2 ИПК-2.5	Тема 1. Программы и другие электронные продукты для решения задач в области химии и химической технологии	2		0	4	Подготовка к лекциям и практическим занятиям, тестированию. 6.1.3: С. 5-49			
	Тема 2.1. Химические редакторы. Принципы графического изображения химических формул в органической химии.	2		1	6	Подготовка к лекциям и практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.3: С. 50-83			
	Тема 2.2. Химические редакторы. Современные пакеты программ для изображения химических формул и уравнений реакций.	2		2	6				
	Тема 3.1. Базы данных и электронные библиотеки по химии	2		2	10	Подготовка к лекциям и практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.2: С. 18-36			
	Тема 3.2. Системы управления библиографическими базами данных	2		2	10				
	Тема 4.1. Компьютерная обработка экспериментальных данных	2		4	10	Подготовка к лекциям и практическим занятиям, тестированию,			
	Тема 4.2. Программы обработки и	2	-	4	15				

Планируемые (контролируемые) результаты освоения: код УК; ОПК; ПК и индикаторы достижения компетенций	Наименование тем	Виды учебной работы				Вид СРС	Наименование используемых активных и интерактивных образовательных технологий	Реализация в рамках практической подготовки (трудоемкость в часах)	Наименование разработанного электронного курса (трудоемкость в часах)
		Контактная работа			Самостоятельная работа				
		Лекции, час	Лабораторные работы, час	Практические занятия, час					
	визуализации данных					выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.4: С. 11-65			
	<b>Тема 5.1.</b> Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	3		2	11	Подготовка к практическим занятиям, тестированию.			
<b>2 семестр (очно-заочная форма обучения)</b>									
	<b>Тема 5.2.</b> Изучение свойств молекул при помощи методов компьютерной химии. Неэмпирические и эмпирические методы расчета строения молекул			14	18	Подготовка к практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.5: 347-362; 391-407			
	<b>Тема 5.3.</b> Моделирование с использованием пакетов компьютерной математики			20	18	Подготовка к практическим занятиям, тестированию, выполнение заданий для самостоятельной работы. 6.1.1: 132-160			
	<b>ИТОГО по дисциплине</b>	<b>17</b>		<b>51</b>	<b>108</b>				

## 5 ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ.

5.1. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности

### Перечень вопросов к зачету с оценкой по дисциплине

1. Основные направления использования вычислительных технологий в химии.
2. Принципы графического изображения химических формул в органической химии.
3. Химические редакторы. Назначение и возможности.
4. Электронные энциклопедии, справочники и книги по химии и химической технологии.
5. Базы данных и электронные библиотеки по химии.
6. Методология компьютерной идентификации веществ с применением информационно-поисковых систем.
7. Системы управления библиографическими базами данных.
8. Предварительный анализ. Погрешности прямых и косвенных измерений.
9. Статистическая обработка экспериментальных данных. Метод наименьших квадратов.
10. Планирование кинетического эксперимента. Прямая и обратная задачи химической кинетики.
11. Электронные таблицы и программы для статистического и регрессионного анализа и визуализации данных.
12. Основные принципы компьютерной обработки УФ-, ИК- и ЯМР- спектров.
13. Характеристика специализированных программных пакетов для квантово-химических расчетов.
14. Квантово-химические основы электронных и колебательных спектров.
15. Полуэмпирические методы расчета в квантовой химии.
16. Неэмпирические методы расчета.
17. Способы расчета термодинамических параметров химических соединений.
18. Универсальные математические пакеты.
19. Методы численного интегрирования.

### 5.2. Описание показателей и критериев контроля успеваемости, описание шкал оценивания

Для оценки знаний, умений, навыков и формирования компетенции по дисциплине применяется балльно-рейтинговая система контроля и оценки успеваемости обучающихся очной формы и традиционная система контроля и оценки успеваемости обучающихся заочной формы. Основные требования балльно-рейтинговой системы по дисциплине и шкала оценивания приведены в таблицах 7 и 8.

Таблица 7

#### Требования балльно-рейтинговой системы по дисциплине

Виды работ	Количество подвидов работы	Максимальные баллы за подвид работы								Штрафные баллы За нарушение сроков сдачи
		1	2	3	4	5	6	7	8	
Тестирование	2	20	20							
Выполнение практических работ	8	2	2	2	2	2	2	2	2	
Выполнений заданий для самостоятельной работы	8	10	10	10	10	10	10	10	10	До 2 за задание
Посещение занятий	21	1								

## Критерии оценивания результата обучения по дисциплине и шкала оценивания

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Критерии оценивания результатов обучения			
		Оценка «неудовлетворительно» / «не зачтено» 0-54% от max рейтинговой оценки контроля	Оценка «удовлетворительно» / «зачтено» 55-70% от max рейтинговой оценки контроля	Оценка «хорошо» / «зачтено» 71-85% от max рейтинговой оценки контроля	Оценка «отлично» / «зачтено» 86-100% от max рейтинговой оценки контроля
ПК-2. Способен к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации, выбору методик и средств решения задач, анализировать и обеспечивать своевременную актуализацию и верификацию документов	ИПК-2.5. Разрабатывает планы и программы проведения научных исследований и технических разработок	Изложение учебного материала бессистемное, неполное, не может использовать его в рамках поставленных целей и задач, что препятствует усвоению последующего материала	Фрагментарные, поверхностные знания по материалу дисциплины. Изложение полученных знаний неполное, однако это не препятствует усвоению последующего материала. Допускаются отдельные существенные ошибки, исправленные с помощью преподавателя. Затруднения при формулировании основных положений и их применении	Знает материал на достаточно хорошем уровне; представляет основные задачи в рамках постановки целей и выбора оптимальных способов их достижения.	Имеет глубокие знания всего материала структуры дисциплины; освоил новации лекционного курса по сравнению с учебной литературой; изложение полученных знаний полное, системное; допускаются единичные ошибки, самостоятельно исправляемые при собеседовании

## 6 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1. Учебная литература

- 6.1.1. Кафаров В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: / В.В. Кафаров, М.Б.Глебов. – М.: Высшая школа, 1991,- 400с.
- 6.1.2. Малахова, Ю. Н. Информационные технологии в химии полимеров : учебно-методическое пособие / Ю. Н. Малахова, Т. Е. Григорьев, С. Н. Чвалун. — Москва : РТУ МИРЭА, 2022. — 47 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/265592>.
- 6.1.3. Зайцев, М. А. Информационные технологии в обучении химии : учебно-методическое пособие : в 2 частях / М. А. Зайцев. — Киров : ВятГУ, [б. г.]. — Часть 1 : Материалы для самостоятельной работы студентов — 2017. — 109 с. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/134625>
- 6.1.4. Леонович, А. А. Основы научных исследований : учебное пособие / А. А. Леонович, А. В. Шелоумов. — 2-е изд., перераб. и доп. — Санкт-Петербург : СПбГЛТУ, 2020. — 100 с. — ISBN 978-5-9239-1144-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/133738>».
- 6.1.5. «Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие / В. И. Барановский. — 3-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2022. — 428 с. — ISBN 978-5-8114-3961-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/206195>».

Библиотечный фонд укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 0,25 экземпляра каждого из изданий, указанных выше на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих соответствующую дисциплину (модуль).

### 6.2. Методические указания, рекомендации и другие материалы к занятиям

- 6.2.1 Методические рекомендации по организации и планированию самостоятельной работы студентов по дисциплине. Приняты Учебно-методическим советом НГТУ им. Р.Е. Алексеева, протокол № 2 от 22 апреля 2013 г. Электронный адрес: [http://www.nntu.ru/RUS/otd\\_sl/ymy/metod\\_dokym\\_obraz/met\\_rekom\\_organiz\\_samoct\\_rab.pdf?20](http://www.nntu.ru/RUS/otd_sl/ymy/metod_dokym_obraz/met_rekom_organiz_samoct_rab.pdf?20).
- 6.2.2 Прямая и обратная задачи химической кинетики: методические указания к практическим занятиям по дисциплине «Компьютерные технологии в науке и производстве» для магистров ХТ - Н.Новгород, 2013.

## 7 ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебный процесс по дисциплине обеспечен необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства (состав по дисциплине определен в настоящей РПД и подлежит обновлению при необходимости).

### 7.1. Перечень информационных справочных систем

Дисциплина, относится к группе дисциплин, в рамках которых предполагается использование информационных технологий как вспомогательного инструмента. Информационные технологии применяются в следующих направлениях: при подготовке и оформлении отчетов о лабораторных работах, выполнении заданий для самостоятельной работы.

### Перечень электронных библиотечных систем

№	Наименование ЭБС	Ссылка к ЭБС
1	Консультант студента	<a href="http://www.studentlibrary.ru/">http://www.studentlibrary.ru/</a>
2	Лань	<a href="https://e.lanbook.com/">https://e.lanbook.com/</a>

7.2. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства, необходимого для освоения дисциплины

### Программное обеспечение

№ п/п	Программное обеспечение, используемое в университете на договорной основе	Программное обеспечение свободного распространения
1	Microsoft Windows 10 (подписка MSDN 700593597, подписка DreamSparkPremium, 19.06.19)	Adobe Acrobat Reader <a href="https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader.html">https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader.html</a>
2	Microsoft office 2010 (Лицензия № 49487295 от 19.12.2011)	OpenOffice <a href="https://www.openoffice.org/ru/">https://www.openoffice.org/ru/</a>
3	Консультант Плюс	PTC Mathcad Express <a href="https://www.mathcad.com/ru">https://www.mathcad.com/ru</a>

### Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

В таблице 12 указан перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем, к которым обеспечен доступ (удаленный доступ).

### Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

№ п/п	Наименование профессиональной базы данных, информационно-справочной системы	Доступ к ресурсу (удаленный доступ с указанием ссылки/доступ из локальной сети университета)
1	2	3
1	База данных стандартов и регламентов РОССТАНДАРТ	<a href="https://www.gost.ru/portal/gost//home/standarts">https://www.gost.ru/portal/gost//home/standarts</a>
2	Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем	<a href="https://cyberpedia.su/21x47c0.html">https://cyberpedia.su/21x47c0.html</a>
3	Инструменты и веб-ресурсы для веб-разработки – 100+	<a href="https://techblog.sdstudio.top/blog/instrumenty-i-veb-resursy-dlia-veb-razrabotki-100-plus">https://techblog.sdstudio.top/blog/instrumenty-i-veb-resursy-dlia-veb-razrabotki-100-plus</a>
4	Справочная правовая система «КонсультантПлюс»	доступ из локальной сети

## 8 ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ РЕСУРСЫ ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОВЗ

В таблице 13 указан перечень образовательных ресурсов, имеющих формы, адаптированные к ограничениям их здоровья, а также сведения о наличии специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования.



### Образовательные ресурсы для инвалидов и лиц с ОВЗ

№	Перечень образовательных ресурсов, приспособленных для использования инвалидами и лицами с ОВЗ	Сведения о наличии специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования
1	ЭБС «Консультант студента»	озвучка книг и увеличение шрифта
2	ЭБС «Лань»	специальное мобильное приложение - синтезатор речи, который воспроизводит тексты книг и меню навигации
3	ЭБС «Юрайт»	версия для слабовидящих

Согласно Федеральному Закону об образовании 273-ФЗ от 29.12.2012 г. ст. 79, п.8 "Профессиональное обучение и профессиональное образование обучающихся с ограниченными возможностями здоровья осуществляются на основе образовательных программ, адаптированных при необходимости для обучения указанных обучающихся". АОП разрабатывается по каждой направленности при наличии заявлений от обучающихся, являющихся инвалидами или лицами с ОВЗ и изъявивших желание об обучении по данному типу образовательных программ.

### 9 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ, НЕОБХОДИМОЕ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Учебные аудитории для проведения занятий по дисциплине, оснащены оборудованием и техническими средствами обучения.

В таблице 14 перечислены:

- учебные аудитории для проведения учебных занятий, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения;
- помещения для самостоятельной работы обучающихся, которые оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ДПИ НГТУ.

Таблица 14

### Оснащенность аудиторий и помещений для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

№	Наименование аудиторий и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность аудиторий помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	<b>2305</b> Аудитория для лекционных занятий Нижегородская обл., г. Дзержинск, ул. Гайдара, д. 49	Комплект демонстрационного оборудования: ПК, с выходом на мультимедийный проектор, на базе Intel Pentium G4560 3.5 ГГц, 4 Гб ОЗУ, монитор 20" – 1 шт. Мультимедийный проектор Epson- 1 шт; Экран – 1 шт.	
2	<b>1234</b> Научно-техническая	Комплект демонстрационного оборудования:	• Microsoft Windows 10 Домашняя (поставка с ПК)

№	Наименование аудиторий и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность аудиторий помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
	библиотека ДПИ НГТУ, студенческий читальный зал; Нижегородская обл., г. Дзержинск, ул. Гайдара, д. 49	ПК, с выходом на мультимедийный проектор, на базе Intel Pentium G4560 3.5 ГГц, 4 Гб ОЗУ, монитор 20" – 1 шт. Мультимедийный проектор Epson- 1 шт; Экран – 1 шт.; Набор учебно-наглядных пособий	<ul style="list-style-type: none"> <li>• LibreOffice 6.1.2.1. (свободное ПО)</li> <li>• Foxit Reader (свободное ПО);</li> <li>• 7-zip для Windows (свободное ПО)</li> </ul>
3	<b>1443а</b> компьютерный класс - помещение для СРС, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), Нижегородская обл., г. Дзержинск, ул. Гайдара, д. 49	ПК на базе Intel Celeron 2.67 ГГц, 2 Гб ОЗУ, монитор Acer 17" – 4 шт. ПК подключены к сети «Интернет» и обеспечивают доступ в электронную информационно-образовательную среду университета	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Microsoft Windows 7 (подписка DreamSpark Premium)</li> <li>• Apache OpenOffice 4.1.8 (свободное ПО);</li> <li>• Mozilla Firefox (свободное ПО);</li> <li>• Adobe Acrobat Reader (свободное ПО);</li> <li>• 7-zip для Windows (свободное ПО);</li> <li>• КонсультантПлюс (ГПД № 0332100025418000079 от 21.12.2018);</li> </ul>

## **10 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ОБУЧАЮЩИМСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

10.1. Общие методические рекомендации для обучающихся по освоению дисциплины, образовательные технологии

Дисциплина реализуется посредством проведения контактной работы с обучающимися (включая проведение текущего контроля успеваемости), самостоятельной работы обучающихся и промежуточной аттестации.

Контактная работа: аудиторная, внеаудиторная, а также проводится в электронной информационно-образовательной среде института (далее - ЭИОС).

Преподавание дисциплины ведется с применением следующих видов образовательных технологий:

- балльно-рейтинговая технология оценивания;

При преподавании дисциплины используются современные образовательные технологии, позволяющие повысить активность обучающихся при освоении материала курса и предоставить им возможность эффективно реализовать часы самостоятельной работы.

Весь лекционный материал курса сопровождается компьютерными презентациями, в которых наглядно преподносятся материал различных разделов курса, что дает возможность обсудить материал с обучающимися во время чтения лекций, активировать их деятельность при освоении материала.

На лекциях и практических занятиях реализуются интерактивные технологии, приветствуются вопросы и обсуждения, используется лично-ориентированный подход, технология работы в малых группах, что позволяет обучающимся проявить себя, получить навыки самостоятельного изучения материала, выровнять уровень знаний в группе.

Все вопросы, возникшие при самостоятельной работе над домашним заданием подробно разбираются на практических занятиях и лекциях. Проводятся индивидуальные и групповые консультации с использованием как встреч с обучающимися, так и современных информационных технологий (электронная почта).

Иницируется активность обучающихся, поощряется задание любых вопросов по материалу, практикуется индивидуальный ответ на вопросы обучающегося, рекомендуются методы успешного самостоятельного усвоения материала в зависимости от уровня его базовой подготовки.

Для оценки знаний, умений, навыков и уровня сформированности компетенции применяется балльно-рейтинговая система контроля и оценки успеваемости обучающихся в процессе текущего контроля.

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета с оценкой с учетом текущей успеваемости.

**Результат обучения считается сформированным на повышенном уровне**, если теоретическое содержание курса освоено полностью. При устных собеседованиях обучающийся исчерпывающе, последовательно, четко и логически излагает учебный материал; свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами заданий, использует в ответе дополнительный материал. Все предусмотренные рабочей учебной программой задания выполнены в соответствии с установленными требованиями, обучающийся способен анализировать полученные результаты, проявляет самостоятельность при выполнении заданий.

**Результат обучения считается сформированным на пороговом уровне**, если теоретическое содержание курса в основном освоено. При устных собеседованиях обучающийся последовательно излагает учебный материал; при затруднениях способен после наводящих вопросов продолжить обсуждение, справляется с задачами, вопросами и другими видами заданий, требующих применения знаний; все предусмотренные рабочей учебной программой задания выполнены в соответствии с установленными требованиями, обучающийся способен анализировать полученные результаты; проявляет самостоятельность при выполнении заданий

**Результат обучения считается несформированным**, если обучающийся при выполнении заданий не демонстрирует знаний учебного материала, допускает ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет задания, не демонстрирует необходимых умений, качество выполненных заданий не соответствует установленным требованиям, качество их выполнения оценено числом баллов ниже трех по оценочной системе, что соответствует допороговому уровню.

## 10.2. Методические указания для занятий лекционного типа

Лекционный курс предполагает систематизированное изложение основных вопросов тематического плана. В ходе лекционных занятий раскрываются базовые вопросы в рамках каждой темы дисциплины (таблица 5 и 6). Обозначаются ключевые аспекты тем, а также делаются акценты на наиболее сложные и важные положения изучаемого материала. Материалы лекций являются опорной основой для подготовки обучающихся к практическим занятиям и выполнения заданий самостоятельной работы, а также к мероприятиям текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине.

## 10.3. Методические указания по освоению дисциплины на практических занятиях

Практические занятия представляют собой детализацию лекционного теоретического материала, проводятся в целях закрепления курса и охватывают все основные разделы. Основной формой проведения практических занятий является

обсуждение наиболее проблемных и сложных вопросов по отдельным темам, а также решение задач и разбор примеров и ситуаций в аудиторных условиях.

Практические занятия обучающихся обеспечивают:

- проверку и уточнение знаний, полученных на лекциях;
- получение умений и навыков обсуждения вопросов по учебному материалу дисциплины;
- подведение итогов занятий по рейтинговой системе, согласно технологической карте дисциплины.

#### 10.4. Методические указания по самостоятельной работе обучающихся

Самостоятельная работа обеспечивает подготовку обучающихся к аудиторным занятиям и мероприятиям текущего контроля и промежуточной аттестации по изучаемой дисциплине. Результаты этой подготовки проявляются в активности обучающихся на занятиях и в качестве выполненных заданий для самостоятельной работы и других форм текущего контроля.

При выполнении заданий для самостоятельной работы рекомендуется проработка материалов лекций по каждой пройденной теме, а также изучение рекомендуемой литературы, представленной в Разделе 6.

В процессе самостоятельной работы при изучении дисциплины обучающиеся могут работать на компьютере в специализированных аудиториях для самостоятельной работы (таблица 15). В аудиториях имеется доступ через информационно-телекоммуникационную сеть «Интернет» к электронной информационно-образовательной среде института (ЭИОС) и электронной библиотечной системе (ЭБС), где в электронном виде располагаются учебные и учебно-методические материалы, которые могут быть использованы для самостоятельной работы при изучении дисциплины.

### 11 ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

11.1. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта в ходе текущего контроля успеваемости

Для текущего контроля знаний обучающихся по дисциплине проводится **комплексная оценка знаний**, включающая

- обсуждение тем курса на практических занятиях;
- выполнение заданий для самостоятельной работы.

#### 11.1.1. Типовые тестовые задания

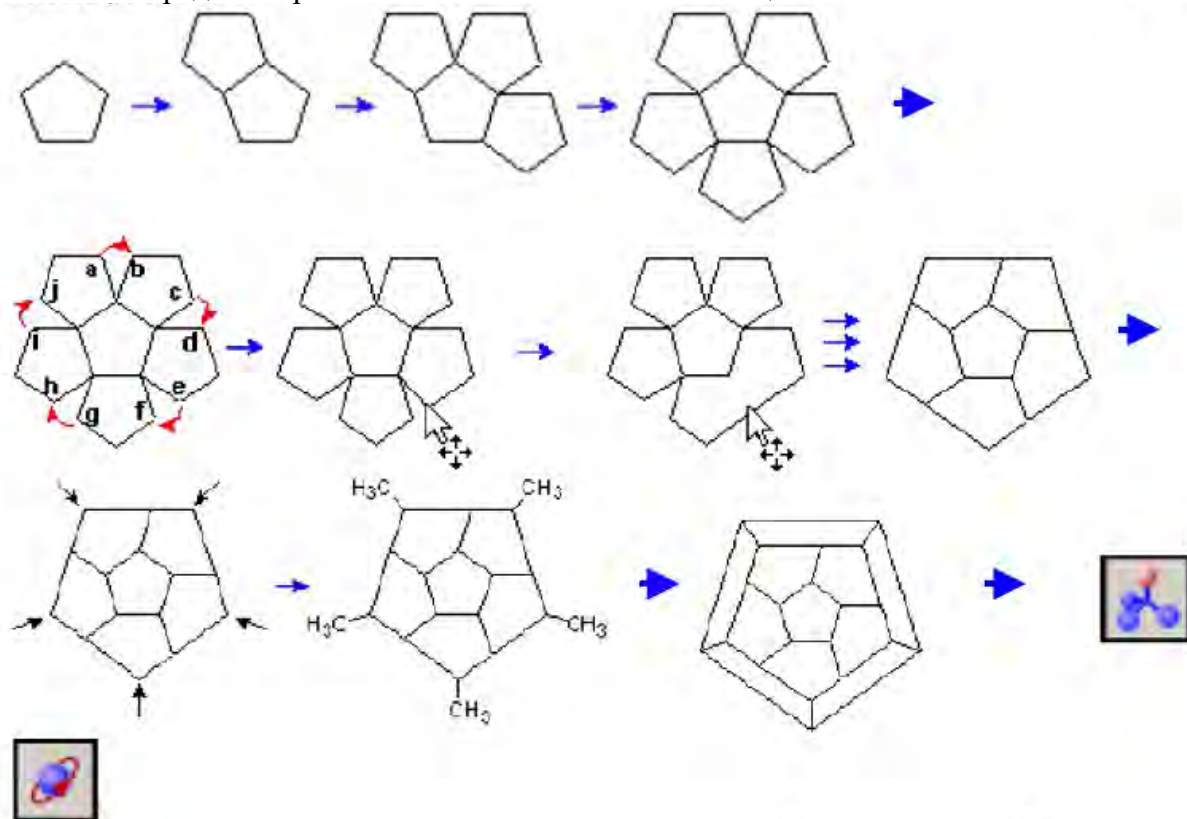
*Примеры тестовых заданий* по дисциплине (оценочные средства в полном объеме хранятся на кафедре «Химические и пищевые технологии»):

1. Выберите программы для квантового-химических расчетов
  - а) ChemSketch
  - б) Hyperchem
  - в) ChemWin
  - г) Gaussian
2. Выберите программы для расчета физических и термодинамических свойств
  - а) PhysProps
  - б) ChemKin
  - в) ChemMaths
  - г) ReactOp
3. Выберите программы для регрессионного и статистического анализа
  - а) DataFit

- б) OriginLab
  - в) ChemPen
  - г) Statistica
4. Выберите модули, которые должна содержать универсальная моделирующая программа
- а) библиотека модулей для расчета химико-технологических аппаратов;
  - б) модуль для представления структурных формул;
  - в) банк физико-химических свойств;
  - г) библиотека математических модулей.
5. Базы данных, которые содержат извлеченную из документов / публикаций (статей, патентов и др.) и объединенную в отдельную для каждого документа запись информацию об их заглавиях, авторах, источниках:
- а) полнотекстовые;
  - б) структурно-химические;
  - в) фактографические;
  - г) библиографические;
  - д) справочники.
6. Индивидуальные регистрационные номера соединений, помещаемые в базу данных Registry, используемые для однозначной идентификации химических веществ
- а) InChI;
  - б) IUPAC Name;
  - в) CAS;
  - г) SMILES
7. Пакет программ Process Engineering Suite разработан компанией:
- а) Invensys Process Systems;
  - б) Aspen Technologies;
  - в) ChemStations;
  - г) Microsoft.
8. Система, способная получать, накапливать и корректировать знания, из некоторой предметной области выводить новые знания, решать на основе этих знаний практические задачи и объяснять ход их решения это:
- а) экспертная система;
  - б) база данных;
  - в) информационная система;
  - г) банк данных.
9. Совокупность технического, программного и организационного обеспечения, а также персонала, предназначенная для того, чтобы своевременно обеспечивать надлежащих людей надлежащей информацией это
- а) экспертная система;
  - б) база данных;
  - в) информационная система;
  - г) банк данных.
10. Организованная совокупность блоков информационных элементов, представленных на машиночитаемых носителях, предназначенных и пригодных для оперативного решения пользовательских, служебных и других задач с использованием средств вычислительной техники это:
- а) экспертная система;
  - б) база данных;
  - в) информационная система;
  - г) банк данных.

### 11.1.2. Типовые задания для самостоятельной работы обучающихся

*Пример 1.* Используя химический редактор ChemSketch Изобразите структуру [5]фуллерена-С20. Определите расчетное значение плотности вещества.



*Пример 2.* Выберите модель расчета фазового равновесия жидкость – жидкость для системы вода – 1,2-дихлорэтан (ДХЭ), которая лучше других описывает экспериментальные данные по их взаимной растворимости.

### 11.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта в ходе промежуточной аттестации по дисциплине

Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине – зачет с оценкой: по результатам накопительного рейтинга или в форме компьютерного тестирования.

#### Перечень вопросов к зачету с оценкой по дисциплине

1. Основные направления использования вычислительных технологий в химии.
2. Принципы графического изображения химических формул в органической химии.
3. Химические редакторы. Назначение и возможности.
4. Электронные энциклопедии, справочники и книги по химии и химической технологии.
5. Базы данных и электронные библиотеки по химии.
6. Методология компьютерной идентификации веществ с применением информационно-поисковых систем.
7. Системы управления библиографическими базами данных.
8. Предварительный анализ. Погрешности прямых и косвенных измерений.
9. Статистическая обработка экспериментальных данных. Метод наименьших квадратов.
10. Планирование кинетического эксперимента. Прямая и обратная задачи химической кинетики.

11. Электронные таблицы и программы для статистического и регрессионного анализа и визуализации данных.
12. Основные принципы компьютерной обработки УФ-, ИК- и ЯМР- спектров.
13. Характеристика специализированных программных пакетов для квантово-химических расчетов.
14. Квантово-химические основы электронных и колебательных спектров.
15. Полуэмпирические методы расчета в квантовой химии.
16. Неэмпирические методы расчета.
17. Способы расчета термодинамических параметров химических соединений.
18. Универсальные математические пакеты.
19. Методы численного интегрирования.

Полный фонд оценочных средств хранится на кафедре «Химические и пищевые технологии»