Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ряполов Петр Алексеевич
Должность: декан ЕНФ
Дата подписания: 04.09.2026 11:24:17
Уникальный программный ключ:
efd3ecdbd183f7649d0e3a33c230c6662946c7c99039b2b268921fde408c1fb6

Аннотация к рабочей программе дисциплины
Вычислительные методы в химии

Цель преподавания дисциплины

Целью преподавания дисциплины «Вычислительные методы в химии» является формирование у студентов мышления, способствующего освоению современными компьютерными технологиями, которые используются в науке и образовании, необходимыми для жизни и деятельности в информационном обществе.

Задачи изучения дисциплины

-изучение компьютерных технологий, которые используются в науке и образовании и получение практических навыков их использования в работе по основной специальности;

- изучение основных сведений об избранных областях химии;

- приобретение знаний о тематике исследования, самостоятельном составлении плана исследования и получении новых научных и прикладных результатов;

- освоение основных закономерностей планирования исследований, получения и обработки результатов исследований, получения и обработки результатов научных экспериментов, сбора, обработки, хранения, представления и передачи научной информации.

Индикаторы компетенций, формируемые в результате освоения дисциплины:

ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

ОПК-5.1 Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля

Разделы дисциплины

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины
1	2
1	Величины, описывающие элемент процесса
2	Основы технических расчетов
3	Методы приближенных вычислений
4	Применение информационных технологий для анализа химических систем
5	Обработка экспериментальных данных
6	Решение задач химической кинетики

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Юго-Западный государственный университет

УТВЕРЖДАЮ:
Декан естественно-научного факультета
(наименование ф-та полностью)
_____ П.А. Ряполов
(подпись, инициалы, фамилия)

«31» 08 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Вычислительные методы в химии
(наименование дисциплины)

ОПОП ВО 04.03.01 Химия
шифр и наименование направления подготовки (специальности)

направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия»
наименование направленности (профиля, специализации)

форма обучения очная
(очная, очно-заочная, заочная)

Курск – 2020

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с ФГОС ВО – бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01 Химия на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета (протокол № 7 «25» 02 2020г.).

Рабочая программа дисциплины обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе для обучения студентов по ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия» на заседании кафедры фундаментальной химии и химической технологии №13 «26» 06 2020 г.

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Кувардин Н.В.

Разработчик программы
к.х.н., доцент _____ Лысенко А.В.

Директор научной библиотеки _____ Макаровская В.Г.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол №9 «25» 06 2021 г., на заседании кафедры фундаментальной химии и химической технологии № «30» 06 2021 г. Протокол N15

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Н.В. Кувардин

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол №9 «25» 06 2021 г., на заседании кафедры фундаментальной химии и химической технологии №14. 18. 06. 2022 г.

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Н.В. Кувардин

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол №__«___»_____20___г., на заседании кафедры фундаментальной химии и химической технологии № «29» 06 2023 г. 13

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Н.В. Кувардин

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) «Органическая и биоорганическая химия», одобренного Ученым советом университета протокол №7 «28» 02 2022 г., на заседании кафедры фундаментальной химии и химической технологии № 9 «27» 03 2024 г.

(наименование кафедры, дата, номер протокола)

Зав. кафедрой _____ Н.В. Кувардин

ВПЧИСЛ

Вписи метод

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) "Органическая и биоорганическая химия", одобренного Ученым советом университета протокол № 9 «27» 02 2023 г. на заседании кафедры ФХиЕТ «27» 06 2023 г., протокол № 13.

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) "Органическая и биоорганическая химия", одобренного Ученым советом университета протокол № 9 «27» 03 2024 г. на заседании кафедры ФХиЕТ «16» 06 2024 г., протокол № 12.

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) "Органическая и биоорганическая химия", одобренного Ученым советом университета протокол №___ «___» _____ 20___г. на заседании кафедры _____ «___» _____20__ г., протокол № ____.

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) "Органическая и биоорганическая химия", одобренного Ученым советом университета протокол №___ «___» _____ 20___г. на заседании кафедры _____ «___» _____20__ г., протокол № ____.

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) "Органическая и биоорганическая химия", одобренного Ученым советом университета протокол №___ «___» _____ 20___г. на заседании кафедры _____ «___» _____20__ г., протокол № ____.

Зав. кафедрой _____

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и рекомендована к реализации в образовательном процессе на основании учебного плана ОПОП ВО 04.03.01 Химия, направленность (профиль) "Органическая и биоорганическая химия", одобренного Ученым советом университета протокол №___ «___» _____ 20___г. на заседании кафедры _____ «___» _____20__ г., протокол № ____.

Зав. кафедрой _____

1 Цель и задачи дисциплины. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

1.1 Цель дисциплины

Целью преподавания дисциплины является формирование у студентов мышления, способствующего освоению расчетно-теоретических и практических методов для решения задач профессиональной деятельности с использованием современной вычислительной техники.

1.2 Задачи дисциплины

- приобретение студентами познаний о величинах, описывающих процесс, основах технических расчетов, источников и классификации погрешностей измерений, приближенных вычислениях;
- применение информационных технологий для анализа химических систем
- освоение информационных технологий для типовых химических расчетов с помощью электронных таблиц;
- применение современных IT-технологий, программных продуктов и баз данных при сборе, анализе, обработке и представлении химической информации по основной специальности.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

Таблица 1.3 – Результаты обучения по дисциплине

Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)		*Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной*	*Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций*
код компетенции	*наименование компетенции*		
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	***Знать:*** основные виды моделирования химической направленности ***Уметь:*** использовать теоретические и эмпирические методы при решении задач химической направленности ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** навыками

Планируемые результаты освоения основной профессиональной образовательной программы (компетенции, закрепленные за дисциплиной)		*Код и наименование индикатора достижения компетенции, закрепленного за дисциплиной*	*Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с индикаторами достижения компетенций*
код компетенции	*наименование компетенции*		
			использования существующих моделей при решении задач химической направленности с помощью вычислительной техники
		ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	***Знать:*** основные виды стандартного программного обеспечения ***Уметь:*** применять программное обеспечение при изучении свойств веществ и процессов с их участием ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** навыками работы на современной вычислительной технике со стандартным программным обеспечением при решении задач химической направленности
ОПК-5	Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	ОПК-5.1 Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	***Знать:*** современные IT-технологии, программные продукты и базы данных ***Уметь:*** собирать, анализировать и обрабатывать экспериментальные данные с применением информационных технологий для анализа химических систем и процессов с их участием ***Владеть (или Иметь опыт деятельности):*** навыками использования современных программных продуктов и информационных баз данных для решения задач химического профиля с учетом основных требований информационной безопасности

2 Указание места дисциплины в структуре основной профессиональной образовательной программы

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» входит в обязательную часть блока 1 «Дисциплины (модули») основной профессиональной образовательной программы – программы бакалавриата 04.03.01 Химия, направленность (профиль, специализация) «Органическая и биоорганическая химия». Дисциплина изучается на 3 курсе в 6 семестре, на 4 курсе в 7 семестре.

3 Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 8 зачетные единицы (з.е.), 288 академических часов.

Таблица 3 - Объём дисциплины

Виды учебной работы	Всего, часов
Общая трудоемкость дисциплины	288
Контактная работа обучающихся с преподавателем по видам учебных занятий (всего)	187,25
в том числе:	
лекции	68
лабораторные занятия	50
практические занятия	68
Самостоятельная работа обучающихся (всего)	73,75
Контроль (подготовка к экзамену)	27
Контактная работа по промежуточной аттестации (всего АттКР)	1,15
в том числе:	
зачет	0,1
зачет с оценкой	не предусмотрен
курсовая работа (проект)	не предусмотрена
экзамен (включая консультацию перед экзаменом)	1,15

4 Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Содержание дисциплины

Таблица 4.1.1 – Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам)

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Содержание
1	2	3
1	Величины, описывающие элемент процесса	Физические величины и их измерения. Относительные величины. Абсолютные величины. Аддитивные ФВ. Размеры ФВ узнают в результате их измерения. Понятие о физической величине. Классификация величин по видам явлений (вещественные, энергетические, характеризующие протекание процессов во времени), по принадлежности к различным типам физических процессов, по степени условной независимости от других величин, по наличию размерности. Основные физические величины. Метрическая система мер. Системы единиц физических величин. Системы единиц. Система СГС. Система МТС. Система МКГСС. Система МКСА. Внесистемные единицы ФВ. Международная система единиц. Основные единицы физических величин СИ. Единицы, имеющие специальные наименования. Размерность физической величины
2	Основы технических расчетов	Типы функций, используемых при описании химико-технологических процессов. Построение графиков. Определение коэффициентов эмпирических формул. Графический метод. Метод средних. Метод наименьших квадратов (МНК). Номограммы. Номография. Номограммы и их классификация. Изображения переменных. Классификация номограмм. Номограммы из выравненных точек. Сетчатые номограммы. Транспарантная номограмма. Погрешности вычислений по номограммам. Возможность представления уравнений номограммами. Приближённые номограммы. Построение номограмм. Функциональная шкала. Номограммы с параллельными функциональными шкалами. Номограммы с наклонными шкалами. Универсальный вид математической модели гидродинамики потока. Время пребывания элементов потока как случайная величина. Экспериментальное изучение распределения времени пребывания элементов потока. Кривые отклика. Получение кривых отклика. Интегральная

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Содержание
1	2	3
		и дифференциальная функции распределения времени пребывания элементов потока. Типовые модели структуры потоков. Модель идеального смешения. Модель идеального вытеснения. Однопараметрическая и двухпараметрическая диффузионные модели. Ячеечная модель. Комбинированные модели. Зона идеального перемешивания - байпасный поток. Зона идеального перемешивания - застойная зона. Зона идеального перемешивания - зона идеального вытеснения. Алгоритм идентификации математического описания структуры потоков Ячеечная модель. Однопараметрическая диффузионная модель. Ячеечно-циркуляционная модель. Двухпараметрическая диффузионная модель. Комбинированные модели. Элементарный объем. Перемешивание жидкостей. Скорость осаждения. Осаждение под действием силы тяжести. Максимальный (критический) диаметр осаждающихся частиц. Осаждение под действием центробежных сил. Фильтрование
3	Методы приближенных вычислений	Элементы теории погрешностей. Обработка результатов измерений. Оценка погрешности измерений. Оценка точности отсчета на приборах. Определение абсолютной и относительной погрешности непосредственного измерения какой-нибудь величины. Выбор необходимой точности измерения. Вычисление средних погрешностей серии измерений. Вычисление относительной погрешности значения, получаемого в результате расчета по формуле, включающей несколько непосредственно измеренных величин. Выражение результатов физико-химических измерений в виде таблиц и графиков. Составление таблиц. Правила округления чисел. Интерполяция. Экстраполяция. Построение графиков. Выбор масштаба. Приближенные величины и действия с ними. Ошибки измерений. Систематические ошибки. Случайные ошибки. Промахи. Приближенные решения. Решение уравнений. Графическое решение уравнений. Решение уравнений методом итераций (последовательных приближений). Решение систем уравнений. Вычисление определенных интегралов. Графический метод. Метод Симпсона. Метод трапеций
4	Применение информационных технологий для анализа химических систем	Основные понятия информационной системы. Понятие информационной системы (ИС): основные термины и определения, свойства. Этапы развития ИС. Этапы развития информационных систем.

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Содержание
1	2	3
		Понятие информационной технологии (ИТ). Свойства информационной технологии. Соотношение между ИС и ИТ. Применение информационных технологий для решения задач из различных областей химии. Типовые приемы анализа химических систем с помощью электронных систем. Применение электронных таблиц для типовых химических расчетов. Анализ зависимости степени протолиза слабых кислот от концентрации кислоты. Расчет стехиометрического состава, избытка и недостатка реагентов в необратимой химической реакции. Расчет кривой титрования сильной кислоты сильным основанием. Определение значений связанных физико-химических параметров с помощью решения нелинейного уравнения. Решение прямой задачи химического равновесия
5	Обработка экспериментальных данных	Линейная и квадратичная интерполяция. Статистический подход к обработке экспериментальных данных. Метод наименьших квадратов. Парная линейная регрессия на примере исследования зависимости теплоемкости вещества от температуры Множественная линейная регрессия на примере исследования эмпирической зависимости выхода продукта от температуры и давления. Примеры построения и применения нелинейных регрессионных моделей. Расчет изотермы равновесия реакции с помощью внутренне нелинейной регрессионной модели
6	Решение задач химической кинетики	Постановка прямой задачи химической кинетики. Кинетика необратимых химических реакций. Кинетика обратимых химических реакций. Кинетика многостадийных химических реакций. Методы решения дифференциальных уравнений первого порядка. Решение прямой задачи химической кинетики с помощью электронных таблиц. Постановка и методы решения обратной задачи химической кинетики. Решение обратной задачи химической кинетики с помощью электронных таблиц. Исследование кинетических кривых химических реакций

Таблица 4.1.2 – Содержание дисциплины и его методическое обеспечение

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Виды деятельности			Учебно-методические материалы	Формы текущего контроля успеваемости *(по неделям семестра)*	Компетенции
		лек., час	№ лаб.	№ пр.			
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Величины, описывающие элемент процесса	6	1	1	У-1, У-4-У-8, МУ-1, МУ-6	Т, ЛР1, ПЗ1, Р	ОПК-3
2	Основы технических расчетов	18	2-4	2-4	У-2, У-3, У-9-У-14, МУ-2-МУ-4, МУ-6-МУ-9	Т, ЛР2-4, ПЗ2-4, Д	ОПК-3
3	Методы приближенных вычислений	8	5-9	5-8	У-2, У-15-У-20, МУ-5, МУ-6	Т, ЛР5-9, ПЗ5-8, Р	ОПК-3
4	Применение информационных технологий для анализа химических систем	12	10-12	9-10	У-2, У-9-У-20, МУ-9-МУ-11	Т, ЛР10-12, ПЗ9-10, Д	ОПК-5
5	Обработка экспериментальных данных	12	13-14	11-12	У-2, У-9-У-20, МУ-9-МУ-11	Т, ЛР13-14, ПЗ11-12, Р	ОПК-5
6	Решение задач химической кинетики	12	15	13-17	У-2, У-9-У-20, МУ-9-МУ-11	Т, ЛР15, ПЗ13-17, Д	ОПК-5

Т – тест; ЛР – выполнение лабораторной работы; ПЗ – выполнение практического задания; Р – реферат, Д - доклад

4.2 Лабораторные работы и (или) практические занятия

4.2.1 Лабораторные работы

Таблица 4.2.1 - Лабораторные работы

№	Наименование лабораторной работы	Объем, час.
1	2	3
	6 семестр	
1	Лабораторная работа №1. Физические величины и единицы их измерения	2
2	Лабораторная работа №2. Определение коэффициентов эмпирических формул Графический метод. Метод средних. Метод наименьших квадратов	4
3	Лабораторная работа №3. Построение номограмм	4
4	Лабораторная работа №4. Методы приближенных вычислений в химии и химической технологии	4
5	Лабораторная работа №5. Приближенные решения	2
6	Лабораторная работа №6. Линейная и квадратичная интерполяция	4
7	Лабораторная работа №7. Исследование эмпирической зависимости теплоемкости вещества от температуры	4

№	Наименование лабораторной работы	Объем, час.
1	2	3
8	Лабораторная работа №8. Исследование эмпирической зависимости выхода продукта от температуры и давления	4
9	Лабораторная работа №9. Исследование внутренне нелинейных эмпирических зависимостей. Построение изотермы равновесия	4
Итого за 6 семестр		32
7 семестр		
1	Лабораторная работа №10. Линейная и квадратичная интерполяция	2
2	Лабораторная работа №11. Исследование эмпирической зависимости теплоемкости вещества от температуры	2
3	Лабораторная работа №12. Исследование эмпирической зависимости выхода продукта от температуры и давления	2
4	Лабораторная работа №13. Линеаризация нелинейных эмпирических зависимостей. Эмпирическая оценка скорости химической реакции	4
5	Лабораторная работа №14. Исследование внутренне нелинейных эмпирических зависимостей. Построение изотермы равновесия	4
6	Лабораторная работа №15. Численное решение обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка методами Эйлера	4
Итого за 7 семестр		18
Итого		50

4.2.2 Практические занятия

Таблица 4.2.2 - Практические занятия

№	Наименование практического (семинарского) занятия	Объем, час
1	2	3
6 семестр		
1	Практическое занятие №1. Позиционные системы счисления	4
2	Практическое занятие №2. Определение размера осаждающихся частиц	4
3	Практическое занятие №3. Осаждение твердых частиц в жидкости под действием силы тяжести	4
4	Практическое занятие №4. Разделение гетерогенных систем	4
5	Практическое занятие №5. Типовые химические расчеты. Расчет концентраций и pH раствора сильной кислоты	4
6	Практическое занятие №6. Типовые химические расчеты. Расчет степени протолиза слабых кислот	4
7	Практическое занятие №7. Типовые химические расчеты. Расчет стехиометрического состава, избытка и недостатка реагентов в необратимой химической реакции	4
8	Практическое занятие №8. Типовые химические расчеты. Расчет кривой титрования слабого основания слабой кислотой	4
Итого за 6 семестр		32
7 семестр		
1	Практическое занятие №9. Численное решение нелинейного уравнения на примере задачи определения значений связанных физико-химических параметров	4

№	Наименование практического (семинарского) занятия	Объем, час
1	2	3
2	Практическое занятие №10. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений на примере расчета материального баланса химических реакций	4
3	Практическое занятие №11. Численное решение задачи поиска экстремума функции одной переменной	4
4	Практическое занятие №12. Численное решение задачи оптимального распределения ресурсов	4
5	Практическое занятие №13. Решение прямой задачи химической кинетики необратимой химической реакции	4
6	Практическое занятие №14. Решение прямой задачи химической кинетики обратимой химической реакции	4
7	Практическое занятие №15. Решение прямой задачи химической кинетики многостадийной химической реакции	4
8	Практическое занятие №16. Решение обратной задачи химической кинетики многостадийной химической реакции	4
9	Практическое занятие №17. Решение прямой задачи химического равновесия	4
Итого за 7семестр		36
Итого		68

4.3 Самостоятельная работа студентов (СРС)

Таблица 4.3 – Самостоятельная работа студентов

№ раздела (темы)	Наименование раздела (темы) дисциплины	Срок выполнения	Время, затрачиваемое на выполнение СРС, час.
1	2	3	4
6 семестр			
1	Величины, описывающие элемент процесса	1-4 неделя	12
2	Основы технических расчетов	5-12 неделя	20
3	Методы приближенных вычислений	13-18 неделя	15,9
Итого за 6 семестр			47,9
7 семестр			
1	Применение информационных технологий для анализа химических систем	1-4 неделя	5,85
2	Обработка экспериментальных данных	5-12 неделя	10
3	Решение задач химической кинетики	13-18 неделя	10
Итого за 7 семестр			25,85
Итого			73,75
Подготовка к экзамену			27

5 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Студенты могут при самостоятельном изучении отдельных тем и вопросов дисциплин пользоваться учебно-наглядными пособиями, учебным оборудованием и

методическими разработками кафедры в рабочее время, установленное Правилами внутреннего распорядка работников.

Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по данной дисциплине организуется:

библиотекой университета:

- библиотечный фонд укомплектован учебной, методической, научной, периодической, справочной и художественной литературой в соответствии с УП и данной РПД;

- имеется доступ к основным информационным образовательным ресурсам, информационной базе данных, в том числе библиографической, возможность выхода в Интернет.

кафедрой:

- путем обеспечения доступности всего необходимого учебно-методического и справочного материала;

- путем предоставления ведений о наличии учебно-методической литературы, современных программных средств.

-путем разработки:

- методических рекомендаций, пособий по организации самостоятельной работы студентов;

- тем рефератов и докладов;

- вопросов к зачету и экзамену;

- методических указаний к выполнению практических занятий и лабораторных работ т.д.

типографией университета:

- помощь авторам в подготовке и издании научной, учебной и методической литературы;

- удовлетворение потребности в тиражировании научной, учебной и методической литературы.

6 Образовательные технологии. Практическая подготовка обучающихся. Технологии использования воспитательного потенциала дисциплины

Реализация компетентностного подхода предусматривает широкое использование в образовательном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования общепрофессиональных компетенций обучающихся.

Таблица 6.1 – Интерактивные образовательные технологии, используемые при проведении аудиторных занятий

№	Наименование раздела (лекции, практического или лабораторного занятия)	Используемые интерактивные образовательные технологии	Объем, час.
1	2	3	4
6 семестр			
1	Лекция 1. Величины, описывающие элемент процесса	Лекция-визуализация	4
2	Лекция 2. Основы технических расчетов	Лекция-визуализация	8
Итого лекций			12
3	Лабораторная работа №1. Физические величины и единицы их измерения	Разбор конкретных ситуаций	4
4	Лабораторная работа №3 Построение номограмм	Разбор конкретных ситуаций	4
5	Лабораторная работа №9. Исследование внутренне нелинейных эмпирических зависимостей. Построение изотермы равновесия	Разбор конкретных ситуаций	4
Итого лабораторных работ			12
Итого			24

Содержание дисциплины обладает значительным воспитательным потенциалом, поскольку в нем аккумулирован современный и научный опыт человечества. Реализация воспитательного потенциала дисциплины осуществляется в рамках единого образовательного и воспитательного процесса и способствует непрерывному развитию личности каждого обучающегося. Дисциплина вносит значимый вклад в формирование профессиональной культуры обучающихся. Содержание дисциплины способствует профессионально-трудовому воспитанию обучающихся.

Реализация воспитательного потенциала дисциплины подразумевает:

– целенаправленный отбор преподавателем и включение в лекционный материал, материал для практических и лабораторных занятий содержания, демонстрирующего обучающимся образцы настоящего научного подвижничества создателей и представителей данной отрасли науки, высокого профессионализма ученых, их ответственности за результаты и последствия деятельности для человека и общества; примеры людей, причастных к развитию науки и производства, а также примеры творческого мышления;

– применение технологий, форм и методов преподавания дисциплины, имеющих высокий воспитательный эффект за счет создания условий для взаимодействия обучающихся с преподавателем, другими обучающимися (командная работа, деловые игры, разбор конкретных ситуаций, круглые столы);

– личный пример преподавателя, демонстрацию им в образовательной деятельности и общении с обучающимися за рамками образовательного процесса высокой общей и профессиональной культуры.

Реализация воспитательного потенциала дисциплины на учебных занятиях направлена на поддержание в университете единой развивающей образовательной и воспитательной среды. Реализация воспитательного потенциала дисциплины в ходе самостоятельной работы обучающихся способствует развитию в них целеустремленности, инициативности, креативности, ответственности за результаты своей работы – качеств, необходимых для успешной социализации и профессионального становления.

7 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

7.1 Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения основной профессиональной образовательной программы

Таблица 7.1 – Этапы формирования компетенций

Код и наименование компетенции	Этапы* формирования компетенций и дисциплины (модули)и практики, при изучении/ прохождении которых формируется данная компетенция		
	начальный	основной	завершающий
1	2	3	4
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Информатика	Строение вещества Вычислительные методы в химии	Вычислительные методы в химии
ОПК-5 Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	Основы поиска и систематизации научно-технической информации Информатика	Вычислительные методы в химии	Вычислительные методы в химии

7.2 Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Таблица 7.2 – Показатели и критерии оценивания компетенций, шкала оценивания

Код компетенции/ этап *(указывается название этапа из п.7.1)*	Показатели оценивания компетенций *(индикаторы достижения компетенций, закрепленные за дисциплиной)*	Критерии и шкала оценивания компетенций		
		Пороговый уровень («удовлетворительно»)	Продвинутый уровень (хорошо»)	Высокий уровень («отлично»)
1	2	3	4	5
ОПК-3 начальный, основной, завершающий	ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	***Знать:*** недостаточно хорошо основные виды моделирования химической направленности ***Уметь:*** недостаточно хорошо использовать теоретические и эмпирические методы при решении задач химической направленности ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** недостаточными навыками использования существующих моделей при решении задач химической направленности с помощью вычислительной техники	***Знать:*** хорошо основные виды моделирования химической направленности ***Уметь:*** хорошо использовать теоретические и эмпирические методы при решении задач химической направленности ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** средними навыками использования существующих моделей при решении задач химической направленности с помощью вычислительной техники	***Знать:*** отлично основные виды моделирования химической направленности ***Уметь:*** на высоком уровне использовать теоретические и эмпирические методы при решении задач химической направленности ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** профессиональными навыками использования существующих моделей при решении задач химической направленности с помощью вычислительной техники
	ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении	***Знать:*** недостаточно хорошо основные виды стандартного программного обеспечения	***Знать:*** хорошо основные виды стандартного программного обеспечения ***Уметь:*** хорошо	***Знать:*** отлично основные виды стандартного программного обеспечения ***Уметь:*** на высоком

Код компетенции/ этап *(указывается название этапа из п.7.1)*	Показатели оценивания компетенций *(индикаторы достижения компетенций, закрепленные за дисциплиной)*	Критерии и шкала оценивания компетенций		
		Пороговый уровень («удовлетворительно»)	Продвинутый уровень (хорошо»)	Высокий уровень («отлично»)
1	2	3	4	5
	задач химической направленности	***Уметь:*** недостаточно хорошо применять программное обеспечение при изучении свойств веществ и процессов с их участием ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** недостаточными навыками работы на современной вычислительной технике со стандартным программным обеспечением при решении задач химической направленности	применять программное обеспечение при изучении свойств веществ и процессов с их участием ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** средними навыками работы на современной вычислительной технике со стандартным программным обеспечением при решении задач химической направленности	уровне применять программное обеспечение при изучении свойств веществ и процессов с их участием ***Владеть (****или* ***Иметь опыт деятельности):*** профессиональными навыками работы на современной вычислительной технике со стандартным программным обеспечением при решении задач химической направленности
ОПК-5 начальный, основной, завершающий	ОПК-5.1 Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	***Знать:*** недостаточно современные IT-технологии, программные продукты и базы данных ***Уметь:*** недостаточно хорошо собирать, анализировать и обрабатывать экспериментальные данные с применением информационных технологий для анализа химических систем и процессов с	***Знать:*** хорошо современные IT-технологии, программные продукты и базы данных ***Уметь:*** хорошо собирать, анализировать и обрабатывать экспериментальные данные с применением информационных технологий для анализа химических систем и процессов с их участием	***Знать:*** отлично современные IT-технологии, программные продукты и базы данных ***Уметь:*** на высоком уровне собирать, анализировать и обрабатывать экспериментальные данные с применением информационных технологий для анализа химических систем и процессов с их участием ***Владеть (или Иметь***

Код компетенции/ этап *(указывается название этапа из п.7.1)*	Показатели оценивания компетенций *(индикаторы достижения компетенций, закрепленные за дисциплиной)*	Критерии и шкала оценивания компетенций		
		Пороговый уровень («удовлетворительно»)	Продвинутый уровень (хорошо»)	Высокий уровень («отлично»)
1	2	3	4	5
		их участием ***Владеть (или Иметь опыт деятельности):*** недостаточными навыками использования современных программных продуктов и информационных баз данных для решения задач химического профиля с учетом основных требований информационной безопасности	***Владеть (или Иметь опыт деятельности):*** средними навыками использования современных программных продуктов и информационных баз данных для решения задач химического профиля с учетом основных требований информационной безопасности	***опыт деятельности):*** профессиональными навыками использования современных программных продуктов и информационных баз данных для решения задач химического профиля с учетом основных требований информационной безопасности

7.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения основной профессиональной образовательной программы

Таблица 7.3 - Паспорт комплекта оценочных средств для текущего контроля успеваемости

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Код контроли-руемой компе-тенции (или её части)	Технология формирова-ния	Оценочные средства		Описание шкал оценивания
				наименование	№№ заданий	
1	Величины, описывающие элемент процесса	ОПК-3	Лекция	Т	1-20	Согласно табл.7.2
			Лабораторная работа	ЛР1	1-15	
			Практическое занятие	ПЗ1	1-15	
			СРС	Р(МУ-6)	1-10	

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Код контроли-руемой компе-тенции (или её части)	Технология формирова-ния	Оценочные средства		Описание шкал оценивания
				наименование	№№ заданий	
2	Основы технических расчетов	ОПК-3	Лекция	Т	1-22	
			Лабораторные работы	ЛР2	1-4	
				ЛР3	1-12	
				ЛР4	1-15	
			Практические занятия	ПЗ2	1-15	
				ПЗ3	1-15	
				ПЗ4	1-11	
			СРС	Д	1-10	
				Р	1-20	
3	Методы приближенных вычислений	ОПК-3	Лекция	Т	1-28	
			Лабораторные работы	ЛР5	1-25	
				ЛР6	1-12	
				ЛР7	1-15	
				ЛР8	1-18	
				ЛР9	1-15	
			Практические занятия	ПЗ5	1-12	
				ПЗ6	1-18	
				ПЗ7	1-15	
				ПЗ8	1-15	
			СРС	Р	1-10	
4	Применение информационных технологий для анализа химических систем	ОПК-5	Лекция	Т	1-12	
			Лабораторные работы	ЛР10	1-14	
				ЛР11	1-15	
				ЛР12	1-16	
			Практические занятия	ПЗ9	1-18	
				ПЗ10	1-15	
			СРС	Д	1-18	
5	Обработка экспериментальных данных	ОПК-5	Лекция	Т	1-27	
			Лабораторные работы	ЛР13	1-10	
				ЛР14	1-12	
			Практические занятия	ПЗ11	1-14	
				ПЗ12	1-15	
			СРС	Р	1-10	
6	Решение задач химической кинетики	ОПК-5	Лекция	Т	1-12	
			Лабораторная работа	ЛР15	1-14	
			Практические занятия	ПЗ13	1-15	
				ПЗ14	1-10	
				ПЗ15	1-12	
				ПЗ16	1-14	

№ п/п	Раздел (тема) дисциплины	Код контроли-руемой компе-тенции (или её части)	Технологи я формирова -ния	Оценочные средства		Описание шкал оценивания
				наименова ние	№№ заданий	
				ПЗ17	1-12	
			СРС	Д	1-15	

Примеры типовых контрольных заданий для проведения
текущего контроля успеваемости

Вопросы в тестовой форме по разделу (теме) 1. «Величины, описывающие элемент процесса»:

1 Как называется характеристика одного из свойств физического объекта, под которым понимается физическое явление или процесс, в качественном отношении общая многим физическим объектам, но в количественном отношении индивидуальная для каждого объекта?

а) единицы измерения;

б) физическая величина;

в) размерность;

г) значение.

2. Для каких величин правомочны операции сложения и вычитания?

а) активных б) основных

в) аддитивных г) дополнительных

3. Условно зависимые физические величины называются …

а) дополнительными б) основными

в) зависимыми г) производными

4. Условно независимые физические величины называются?

а) активными б) дополнительными

в) безразмерными г) основными

5. Физические величины, описывающие энергетические характеристики процессов называются …

а) энергетичными б) энергетическими

в) характеризующими процесс г) вещественными

6. Упорядоченная совокупность значений величины это …

а) размерность б) единицы измерения

в) шкала г) система мер

Контрольные вопросы для собеседования по разделу (теме) 3. «Методы приближенных вычислений»

1. Какой тип ссылок необходим для использования в расчетных формулах переменных величин?
2. Какой тип ссылок необходим для использования в расчетных формулах констант (параметров расчетов)?
3. Какие расчетные величины изменяются при изменении объема раствора и почему?
4. Какие расчетные величины не изменяются при изменении объема раствора и почему?
5. Может ли величина pH раствора сильной кислоты быть больше +1?
6. Может ли величина pH раствора сильной кислоты стать отрицательной?
7. Могут ли другие расчетные величины (кроме pH) принимать отрицательные значения?

8. Почему нельзя использовать тип диаграммы «График»?
9. Можно ли соединить точки на графике линиями?
10. Можно ли использовать на графике сглаженные соединительные линии?
11. Можно ли использовать такую расчетную таблицу для двухосновной сильной кислоты? Если да, то как нужно модифицировать расчетные формулы?
12. Можно ли использовать такую расчетную таблицу для расчета pH раствора сильного основания? Если да, то как нужно модифицировать расчетные формулы?
13. Можно ли использовать такую расчетную таблицу для расчета pH слабой кислоты или слабого основания? Если да, то как нужно модифицировать расчетные формулы?
14. Как изменить параметры форматирования текста в ячейках таблиц?
15. Как изменить параметры форматирования чисел в ячейках таблиц?
16. Как изменить параметры форматирования рядов данных на диаграммах?
17. Как изменить диапазон исходных данных для ряда данных и диаграммы в целом?
18. Для чего нужно ручное указание минимального и/или максимального значения на осях?
19. Сколько значащих цифр имеется в исходных данных (значения плотности растворов)?
20. Сколько значащих цифр следует оставлять в результатах расчетов?

Темы рефератов по разделу (теме) 1. «Величины, описывающие элемент процесса»
1. Основные физические величины.
2. Метрическая система мер.
3. Системы единиц физических величин.
4. Система СГС.
5. Система МТС.
6. Система МКГСС.
7. Система МКСА.
8. Внесистемные единицы ФВ.
9. Международная система единиц.
10. Единицы, имеющие специальные наименования.

Темы докладов по разделу (теме) 2. «Основы технических расчетов»
1. Графический метод.
2. Метод средних.
3. Метод наименьших квадратов (МНК).
4. Номограммы и их классификация.
5. Номограммы из выравненных точек.
6. Сетчатые номограммы.
7. Транспарантная номограмма.
8. Приближѐнные номограммы.
9. Номограммы с параллельными функциональными шкалами.
10. Номограммы с наклонными шкалами.

Полностью оценочные материалы и оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости представлены в УММ по дисциплине

Типовые задания для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета (4 семестр) и экзамена (5 семестр). Они проводятся в виде компьютерного и/или бланкового тестирования.

Для тестирования используются контрольно-измерительные материалы (КИМ) – задания в тестовой форме, составляющие банк тестовых заданий (БТЗ) по дисциплине, утвержденный в установленном в университете порядке.

Проверяемыми на промежуточной аттестации элементами содержания являются темы дисциплины, указанные в разделе 4 настоящей программы. Все темы дисциплины отражены в КИМ в равных долях (%). БТЗ включает в себя не менее 100 заданий и постоянно пополняется.

Для проверки *знаний* используются вопросы и задания в различных формах:

-закрытой (с выбором одного или нескольких правильных ответов),

- открытой (необходимо вписать правильный ответ),

- на установление правильной последовательности,

- на установление соответствия.

Умения, навыки и компетенции проверяются с помощью задач (ситуационных, производственных или кейсового характера) и различного вида конструкторов. Все задачи являются многоходовыми. Некоторые задачи, проверяющие уровень сформированности компетенций, являются многовариантными. Часть умений, навыков и компетенций прямо не отражена в формулировках задач, но они могут быть проявлены обучающимися при их решении.

В каждый вариант КИМ включаются задания по каждому проверяемому элементу содержания во всех перечисленных выше формах и разного уровня сложности. Такой формат КИМ позволяет объективно определить качество освоения обучающимися основных элементов содержания дисциплины и уровень сформированности компетенций.

Примеры типовых заданий для проведения
промежуточной аттестации обучающихся

Задание в открытой форме:

1. Может ли величина pH раствора сильной кислоты быть больше +1? Может ли величина pH раствора сильной кислоты стать отрицательной? Могут ли другие расчетные величины (кроме pH) принимать отрицательные значения?

2. Можно ли соединить точки на графике линиями? Можно ли использовать на графике сглаженные соединительные линии?

3. Как изменить параметры форматирования рядов данных на диаграммах? Как изменить диапазон исходных данных для ряда данных и диаграммы в целом?

Задание в закрытой форме:

1 Какие типы экспериментов могут быть использованы для исследования свойств химической системы и протекающих в них процессов?

а) проводимый в компьютерной лаборатории с использованием реактивов и лабораторного оборудования;

б) проводимый в химической лаборатории с использованием реактивов и лабораторного оборудования;

в) проводимый с использованием средств измерительной техники и физических моделей свойств и процессов;

г) проводимый с использованием средств вычислительной техники и математических моделей свойств и процессов.

2. Какой этап проведения вычислительного эксперимента является первым?

а) структурирование данных для построения расчетных таблиц;

б) составление математической модели свойств химических объектов или протекающих в химической системе процессов;

в) описание химической постановки задачи;

г) составление расчетных формул электронных таблиц.

3. Какие приемы используются при реализации проектирования структуры расчетной таблицы?

а) структурирование данных в таблицах;

б) обязательное наличие подписей к ячейкам и столбцам исходных и расчетных данных;

в) упрощение первоначального ввода расчетных формул;

г) упрощения интерпретации полученных результатов.

4. Какие виды величин не будут храниться в тех или иных строках, столбцах или отдельных ячейках расчетной таблицы?

а) константы; б) переменные; в) независимые; г) параметры.

5. Протолиз – это…:

а) процесс передачи электронов между растворенным веществом и растворителем;

б) разложение этого вещества с образованием новых соединений и воды;

в) процесс передачи протонов Н+ между растворенным веществом и растворителем;

г) нет правильного ответа.

Задание на установление правильной последовательности:

Укажите последовательность, как разместить подписи с названиями рядов данных в легенде диаграммы:

1. Щелкните диаграмму.
2. Установите флажок «Добавить легенду».
3. Выберите обозначение в списке «Элементы легенды (ряды)» и нажмите кнопку «Изменить».
4. Щелкните диаграмму.
5. Нажмите кнопку «элементы диаграммы» возле таблицы.
6. Нажмите кнопку «Фильтры диаграммы» рядом с диаграммой, а затем щелкните «Выбрать данные».
7. В поле «Имя ряда» введите новый элемент легенды.
8. Теперь на диаграмме отображается легенда.
9. Нажмите кнопку «ОК».

а) 2, 7, 4(1), 9, 3, 1(4), 6, 5, 8; б) 1(4), 3, 5, 7, 9, 8, 6, 4(1), 2;

в) 4(1), 5, 2, 8, 1(4), 6, 3, 7, 9; г) 5, 3, 1(4), 7, 9, 4(1), 2, 8, 6;

Компетентностно-ориентированная задача:

Рассчитать плотность ρ жидкости, если ее масса Р равна 4,5458 г, а объем V=4,84 см3 (в записи чисел все цифры верные в широком смысле), найти погрешность результата.

7.4 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, регулируются следующими нормативными актами университета:

– положение П 02.016–2018 О балльно-рейтинговой системе оценивания результатов обучения по дисциплинам (модулям) и практикам при освоении обучающимися образовательных программ;

– методические указания, используемые в образовательном процессе, указанные в списке литературы.

Для *текущего контроля успеваемости* по дисциплине в рамках действующей в университете балльно-рейтинговой системы применяется следующий порядок начисления баллов:

Таблица 7.4 – Порядок начисления баллов в рамках БРС

Форма контроля	Минимальный балл		Максимальный балл	
	балл	примечание	балл	примечание
1	2	3	4	5
6 семестр				
Тест 1. Лекция №1. Величины, описывающие элемент процесса	1	Материал усвоен менее чем на 50%	2	Материал усвоен более чем на 50%
Тест 2. Лекция №2. Основы технических расчетов	1	Материал усвоен менее чем на 50%	2	Материал усвоен более чем на 50%
Тест 3. Лекция №3. Методы приближенных вычислений	1	Материал усвоен менее чем на 50%	2	Материал усвоен более чем на 50%
Лабораторная работа №1. Физические величины и единицы их измерения	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №2. Определение коэффициентов эмпирических формул Графический метод. Метод средних. Метод наименьших квадратов	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №3. Построение номограмм	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №4. Методы приближенных вычислений в химии и химической технологии	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №5. Приближенные решения	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №6. Линейная и квадратичная интерполяция	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №7. Исследование эмпирической зависимости теплоемкости вещества от температуры	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №8. Исследование эмпирической зависимости выхода продукта от температуры и давления	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №9. Исследование внутренне нелинейных эмпирических зависимостей. Построение изотермы равновесия	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №1. Позиционные системы счисления	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №2. Определение размера осаждающихся частиц	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №3. Осаждение твердых частиц в жидкости под действием силы тяжести	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил

Форма контроля	Минимальный балл		Максимальный балл	
	балл	примечание	балл	примечание
1	2	3	4	5
Практическое занятие №4. Разделение гетерогенных систем	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №5. Типовые химические расчеты. Расчет концентраций и pH раствора сильной кислоты	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №6. Типовые химические расчеты. Расчет степени протолиза слабых кислот	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №7. Типовые химические расчеты. Расчет стехиометрического состава, избытка и недостатка реагентов в необратимой химической реакции	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №8. Типовые химические расчеты. Расчет кривой титрования слабого основания слабой кислотой	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
СРС	4	Доля правильных ответов менее чем 50%	8	Доля правильных ответов более чем 50%
Итого	24		48	
Посещаемость	0		16	
Зачет	0		36	
Итого	24		100	
7 семестр				
Тест 1. Лекция №1. Применение информационных технологий для анализа химических систем	2	Материал усвоен менее чем на 50%	4	Материал усвоен более чем на 50%
Тест 2. Лекция №2. Обработка экспериментальных данных	2	Материал усвоен менее чем на 50%	4	Материал усвоен более чем на 50%
Тест 3. Лекция №3. Решение задач химической кинетики	2	Материал усвоен менее чем на 50%	4	Материал усвоен более чем на 50%
Лабораторная работа №10. Линейная и квадратичная интерполяция	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №11. Исследование эмпирической зависимости теплоемкости вещества от температуры	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №12. Исследование эмпирической зависимости выхода продукта от температуры и давления	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №13. Линеаризация нелинейных эмпирических зависимостей. Эмпирическая оценка скорости химической реакции	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Лабораторная работа №14. Исследование	1	Выполнил, но не	2	Выполнил и

Форма контроля	Минимальный балл		Максимальный балл	
	балл	примечание	балл	примечание
1	2	3	4	5
внутренне нелинейных эмпирических зависимостей. Построение изотермы равновесия		защитил		защитил
Лабораторная работа №15. Численное решение обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка методами Эйлера	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №9. Численное решение нелинейного уравнения на примере задачи определения значений связанных физико-химических параметров	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №10. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений на примере расчета материального баланса химических реакций	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №11. Численное решение задачи поиска экстремума функции одной переменной	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №12. Численное решение задачи оптимального распределения ресурсов	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №13. Решение прямой задачи химической кинетики необратимой химической реакции	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №14. Решение прямой задачи химической кинетики обратимой химической реакции	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №15. Решение прямой задачи химической кинетики многостадийной химической реакции	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №16. Решение обратной задачи химической кинетики многостадийной химической реакции	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
Практическое занятие №17. Решение прямой задачи химического равновесия	1	Выполнил, но не защитил	2	Выполнил и защитил
СРС	5	Доля правильных ответов менее чем 50%	10	Доля правильных ответов более чем 50%
Итого	24		48	
Посещаемость	0		16	
Экзамен	0		36	
Итого	24		100	

Для промежуточной аттестации обучающихся, проводимой в виде тестирования, используется следующая методика оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности. В каждом варианте КИМ –16 заданий (15 вопросов и одна задача).

Каждый верный ответ оценивается следующим образом:

– задание в закрытой форме –2балла,
– задание в открытой форме – 2 балла,
– задание на установление правильной последовательности – 2 балла,
– задание на установление соответствия – 2 балла,
– решение компетентностно-ориентированной задачи – 6 баллов.

Максимальное количество баллов за тестирование – 36 баллов.

8 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

8.1 Основная учебная литература

1. Дресвянников, А.Ф. Эталоны физических величин [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.Ф. Дресвянников, С.Ю. Ситников, И.Д. Сорокина; Министерство образования и науки России, Казанский национальный исследовательский технологический университет. – Казань: Казанский научно-исследовательский технологический университет (КНИТУ), 2013. – 144 с.: ил., табл. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=258435 (дата обращения: 22.12.2020). – Библиогр. в кн. – ISBN 978-5-7882-1444-3. – Текст: электронный

2. Мухутдинов, А. Р. Основы моделирования и оптимизации материалов и процессов в Microsoft Excel [Электронный ресурс]: учебное пособие / А. Р. Мухутдинов, З. Р. Вахидова, М. Р. Файзуллина; Министерство образования и науки России; Казанский национальный исследовательский технологический университет. - Казань: КНИТУ, 2017. - 172 с.: табл., граф., схем., ил. - URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=560915 (дата обращения: 11.09.2019). - Режим доступа: для автор. пользователей. - Библиогр.: с. 166. - ISBN 978-5-7882-2216-5: Б. ц. - Текст : электронный.

3. Закгейм, А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.Ю. Закгейм. – 3-е изд., перераб. и доп. – Москва: Логос, 2012. – 304 с. – (Новая университетская библиотека). – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=84988 (дата обращения: 22.12.2020). – ISBN 978-98704-471-1. – Текст: электронный.

8.2 Дополнительная учебная литература

4. Дрейзин В.Э. Метрология, стандартизация и технические измерения [Текст]: учебное пособие. Кн. 1: Метрология, стандартизация и сертификация / В.Э. Дрейзин. - Курск: КурскГТУ, 2004. - 120 с.

5. Дрейзин В.Э. Метрология, стандартизация и технические измерения [Электронный ресурс]: учебное пособие. Кн. 1: Метрология, стандартизация и сертификация / В.Э. Дрейзин. - Курск: КурскГТУ, 2004. - 120 с.

6. Схиртладзе А. Г. Метрология, стандартизация и сертификация [Текст]: учебник / А.Г. Схиртладзе, Я.М. Радкевич, С.А. Сергеев. - Старый Оскол: ТНТ, 2010. -539

7. Сергеев А.Г. Метрология, стандартизация, сертификация [Текст]: учебное пособие / М.В. Латышев, В.В. Терегеря. - М.: Логос, 2001. - 536 с.

8. Технические средства измерений [Текст]: учебное пособие / А. С. Гольцов [и др.]. - Старый Оскол: ТНТ, 2013. - 264 с.

9. Практический курс Excel 2000: [Электронный ресурс]. - М.: Кирилл и Мефодий, 2000. - (CD-ROM).

10. Гумеров А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Текст]: учебное пособие / А. М. Гумеров. - Изд. 2-е, перераб. - Санкт-Петербург: Лань, 2014. - 176 с.

11. Шевчук В.П. Моделирование метрологических характеристик интеллектуальных измерительных приборов и систем [Текст]: / В.П. Шевчук. - М.: Физматлит, 2011. - 320 с.

12. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Текст]: учебное пособие. - М.: КолосС, 2008. - 159 с.

13. Захарова А. А. Процессы и аппараты химической технологии [Текст]. - М.: Академия, 2006. - 528 с.

14. Процессы и аппараты химической технологии. Явления переноса, макрокинетика, подобие, моделирование, проектирование [Текст] / под ред. А. М. Кутепова. Т. 2: Механические и гидромеханические процессы. - М.: Логос, 2002. - 600 с.

15. Скатецкий В. Г. Математические методы в химии [Текст]. - М., ТетраСистемс, 2006. - 368 с.

16. Алабужев П. М. Подобие и моделирование в задачах и примерах [Текст]. Ч.1 / П. М. Алабужев. - Курск: КПИ, 1983. – 145 с.

17. Самарский А. А. Математическое моделирование [Текст]: Идеи. Методы. Примеры / А. А. Самарский, А. П. Михайлов. - 2-е изд., испр. - М.: Физматлит, 2005. - 320 с.

18. Самарский А. А. Математическое моделирование [Текст] / А. А. Самарский, А. П. Михайлов. - 2-е изд., испр. - М.: Физматлит, 2001. - 317 с.

19. Данилов, Н.Н. Математическое моделирование [Электронный ресурс]: учебное пособие: [16+] / Н.Н. Данилов; Кемеровский государственный университет. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2014. – 98 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=278827 (дата обращения: 22.12.2020). – ISBN 978-5-8353-1633-5. – Текст: электронный.

20. Шевчук В.П. Моделирование метрологических характеристик интеллектуальных измерительных приборов и систем [Текст]: / В.П. Шевчук. - М.: Физматлит, 2011. - 320 с.

8.3 Перечень методических указаний

1 Физические величины и единицы их измерения [Электронный ресурс]: методические указания по выполнению лабораторных и самостоятельных работ по

для студентов направление подготовки 04.03.01 / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: Лысенко А. В. – Курск: ЮЗГУ, 2022. - 26 с.

2 Определение коэффициентов эмпирических формул [Электронный ресурс]: методические указания по выполнению лабораторной и самостоятельной работы для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А. В. Лысенко. - Курск: ЮЗГУ, 2023. - 19 с.

3 Построение номограмм [Электронный ресурс]: методические указания по выполнению лабораторной и самостоятельной работы / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А. В. Лысенко. - Курск: ЮЗГУ, 2023. - 18 с.

4 Методы приближенных вычислений в химии и химической технологии [Электронный ресурс]: методические указания по выполнению лабораторной и самостоятельной работы / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А. В. Лысенко. - Курск: ЮЗГУ, 2023. - 28 с.

5 Приближенные решения [Электронный ресурс]: методические указания по выполнению лабораторной и самостоятельной работы для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А. В. Лысенко. - Курск: ЮЗГУ, 2023. - 14 с.

6 Вычислительные методы в химии [Электронный ресурс]: методические указания по выполнению самостоятельной работы студентов / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А. В. Лысенко. - Курск: ЮЗГУ, 2023. - 36 с.

7 Гидродинамическое подобие [Электронный ресурс]: методические указания по выполнению практической и самостоятельной работы для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия / Юго-Западный государственный университет; сост. А.В. Лысенко. - Курск: ЮЗГУ, 2023. - 19 с.

8 Разделение гетерогенных систем [Электронный ресурс]: методические указания по выполнению практической и самостоятельной работы для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия / Юго-Зап. гос. ун-т; сост. А.В. Лысенко. - Курск: ЮЗГУ, 2023. – 24 с.

9. Применение электронных таблиц для типовых химических расчетов [Электронный ресурс]: методические рекомендации по выполнению лабораторных работ для студентов направления подготовки 04.03.01 / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. - Курск, 2022. - 38 с.

10. Информационные системы и прикладные программы в химии [Электронный ресурс]: методические рекомендации по выполнению самостоятельной работы студентов направления подготовки 04.03.01 Химия / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. - Курск, 2022. - 72 с.

8.4 Другие учебно-методические материалы

Отраслевые научно-технические журналы в библиотеке университета:

Вестник МГУ. Серия 2. Химия

Журнал аналитической химии

Журнал ВХО им. Д. И. Менделеева

Журнал неорганической химии

Журнал общей химии

Журнал органической химии
Журнал прикладной химии
Журнал структурной химии
Журнал физической химии
Неорганические материалы
Известия Сибирского отделения АН СССР. Серия химических наук
Российский химический журнал
Теоретическая и экспериментальная химия

9 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. http://biblioclub.ru - Электронно-библиотечная система «Университетская библиотека онлайн»
2. http://www.consultant.ru - Официальный сайт компании «Консультант Плюс».
3. Федеральный портал «Российское образование» http://www.edu.ru/
4. Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» http://school-collection.edu.ru/
5. Химические сайты: http://www.xumuk.ru/, http://chemistry.ru/, http://www.alhimikov.net/

10 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Основными видами аудиторной работы студента при изучении дисциплины «Вычислительные методы в химии» являются лекции, лабораторные работы и практические занятия. Студент не имеет права пропускать занятия без уважительных причин.

На лекциях излагаются и разъясняются основные понятия темы, связанные с ней теоретические и практические проблемы, даются рекомендации для самостоятельной работы. В ходе лекции студент должен внимательно слушать и конспектировать материал.

Изучение наиболее важных тем или разделов дисциплины завершают лабораторные занятия, которые обеспечивают: контроль подготовленности студента; закрепление учебного материала; приобретение опыта устных публичных выступлений, ведения дискуссии, в том числе аргументации и защиты выдвигаемых положений и тезисов.

Практическим занятиям предшествует самостоятельная работа студента, связанная с освоением материала, полученного на лекциях, и материалов, изложенных в учебниках и учебных пособиях, а также литературе, рекомендованной преподавателем.

По согласованию с преподавателем или по его заданию студенты готовить рефераты по отдельным темам дисциплины, выступать на занятиях с докладами.

Основу докладов составляет, как правило, содержание подготовленных студентами рефератов.

Качество учебной работы студентов преподаватель оценивает по результатам тестирования, собеседования, защиты отчетов по лабораторным работам, а также по результатам докладов и рефератов.

Преподаватель уже на первых занятиях объясняет студентам, какие формы обучения следует использовать при самостоятельном изучении дисциплины «Вычислительные методы в химии»: конспектирование учебной литературы и лекции, составление словарей понятий и терминов и т. п.

В процессе обучения преподаватели используют активные формы работы со студентами: чтение лекций, привлечение студентов к творческому процессу на лекциях, промежуточный контроль путем отработки студентами пропущенных лекции, участие в групповых и индивидуальных консультациях (собеседовании). Эти формы способствуют выработке у студентов умения работать с учебником и литературой. Изучение литературы составляет значительную часть самостоятельной работы студента. Это большой труд, требующий усилий и желания студента. В самом начале работы над книгой важно определить цель и направление этой работы. Прочитанное следует закрепить в памяти. Одним из приемов закрепление освоенного материала является конспектирование, без которого немыслима серьезная работа над литературой. Систематическое конспектирование помогает научиться правильно, кратко и четко излагать своими словами прочитанный материал.

Самостоятельную работу следует начинать с первых занятий. От занятия к занятию нужно регулярно прочитывать конспект лекций, знакомиться с соответствующими разделами учебника, читать и конспектировать литературу по каждой теме дисциплины. Самостоятельная работа дает студентам возможность равномерно распределить нагрузку, способствует более глубокому и качественному усвоению учебного материала. В случае необходимости студенты обращаются за консультацией к преподавателю по вопросам дисциплины «Вычислительные методы в химии» с целью усвоения и закрепления компетенций.

Основная цель самостоятельной работы студента при изучении дисциплины «Вычислительные методы в химии» - закрепить теоретические знания, полученные в процессе лекционных занятий, а также сформировать практические навыки самостоятельного анализа особенностей дисциплины.

11 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Libreoffice операционная система Windows
Антивирус Касперского *(или ESETNOD)*

12 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа и лаборатории кафедры фундаментальной химии и химической технологии, оснащенные учебной мебелью: столы, стулья для обучающихся; стол, стул для преподавателя; доска. Класс ПЭВМ (8 шт): (ASUS) P7P55LX.tDOR3/4096 Mb/Coree; 3-540/SHTA-11; 500 GbI-fitachi/PCI-E 512 Mb Монитор TFTWide23”; мультимедиацентр: ноутбук ASUSX50VLPMD-T2330/14"/1024Mb/ 160Gb/ сумка/проектор inFocusIN24+; мультимедиацентр: телевизор «PHILIPS», DVDPlayerDV-2240; спектрофотометр ПромЭкоЛаб ПЭ-5400В.

13 Лист дополнений и изменений, внесенных в рабочую программу дисциплины

Номер изменения	Номера страниц				Всего страниц	Дата	Основание для изменения и подпись лица, проводившего изменения
	изме-нённых	заменённых	аннулиро-ванных	новых			