

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

СОГЛАСОВАНО

Директор ИнБиоХим
Лазуткина

Ю.С.

Рабочая программа дисциплины

Код и наименование дисциплины: **Б1.Б.1 «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии»**

Код и наименование направления подготовки (специальности): **18.04.01**

Химическая технология

Направленность (профиль, специализация): **Технология переработки пластмасс и эластомеров**

Статус дисциплины: **обязательная часть (базовая)**

Форма обучения: **очная**

Статус	Должность	И.О. Фамилия
Разработал	доцент	А.В. Протопопов
Согласовал	Зав. кафедрой «ХТ»	В.В. Коньшин
	руководитель направленности (профиля) программы	В.В. Коньшин

г. Барнаул

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код компетенции из УП и этап её формирования	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
		знать	уметь	владеть
ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	Методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов	
ОК-3	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала	Основные закономерности взаимодействия, направления саморазвития, направления использования творческого потенциала	формулировать цели профессионального и личностного развития, оценивать творческие возможности, применять методы и средства познания для личностного и профессионального развития	
ОК-5	способностью к профессиональному росту, к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности	теоретические основы квантово-химических и физико-химических методов исследования, области их применения; принципы проведения эксперимента для физико-химических методов и методику расчета для квантово-химических методов.	интерпретировать результаты, полученные при использовании физико-химических методов исследований.	приёмами выбора квантово-химических и физико-химических методов для конкретного исследования.
ОПК-3	способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки	современные теоретические и экспериментальные методы исследования, используемые для качественного и количественного определения химических соединений, их	работать с пакетами химических программ для расчёта термодинамических параметров и физико-химических свойств соединений	современными способами расчета макрохарактеристик соединений на основе методов квантовой химии и спектрального анализа

Код компетенции из УП и этап её формирования	Содержание компетенции	В результате изучения дисциплины обучающиеся должны:		
		знать	уметь	владеть
		основных характеристик, а также для исследования направлений протекания химических реакций		
ОПК-4	готовностью к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез	современные средства вычислительной техники, коммуникаций и связи, методы исследований, проектирования и проведения экспериментальных работ	Рассчитывать нормативы материальных затрат (нормы расхода сырья, полуфабрикатов, материалов, энергии)	

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), предшествующие изучению дисциплины, результаты освоения которых необходимы для освоения данной дисциплины.	Компьютерные технологии в науке и проектировании, Приборы и методы определения химического состава веществ и материалов
Дисциплины (практики), для которых результаты освоения данной дисциплины будут необходимы, как входные знания, умения и владения для их изучения.	Выпускная квалификационная работа, Методы модификации физических и химических характеристик веществ, Методы получения материалов различного назначения, Пакеты прикладных программ и компьютерная графика, Старение и стабилизация полимерных материалов

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

Общий объем дисциплины в з.е. /час: 4 / 144

Форма промежуточной аттестации: Экзамен

Форма обучения	Виды занятий, их трудоемкость (час.)				Объем контактной работы
	Лекции	Лабораторные	Практические	Самостоятельная	

		работы	занятия	работа	обучающегося с преподавателем (час)
очная	16	0	32	96	57

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

Форма обучения: очная

Семестр: 1

Лекционные занятия (16ч.)

- 1. лекция 1 {лекция с разбором конкретных ситуаций} (4ч.)[1,3]** Расчёт эффективных зарядов на атомах с использованием метода теории функционала плотности (DFT)
- 2. лекция 2 {лекция с разбором конкретных ситуаций} (3ч.)[1,3]** Расчет термодинамических величин приближенным методом РМЗ
- 3. лекция 3 {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[1,3]** Расчет ИК-спектров веществ с использованием метода DFT
- 4. лекция 4 {лекция с разбором конкретных ситуаций} (3ч.)[1,3]** Расчет спектров ЯМР ^1H и с ЯМР ^{13}C использованием программ для обработки графической информации и инженерных расчётов
- 5. лекция 5 {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[3,9]** Исследование строения органических и неорганических соединений по базам данных масс-спектров (NIST и др.)
- 6. лекция 6 {лекция с разбором конкретных ситуаций} (2ч.)[5,6,7,9]** Комплексный анализ строения органических и неор-ганических соединений по базам данных (SDBS, БД «Химия» и др.).

Практические занятия (32ч.)

- 1. Занятие 1(6ч.)[1,3,5,6,7]** Обзор методов, используемых для исследования органических веществ. Физико-химические и квантово-химические методы исследования в химии
- 2. Занятие 2(6ч.)[8]** Расчетные методы квантовой химии.
- 3. Занятие 3(6ч.)[3,8]** Полуэмпирические методы квантовой химии
- 4. Занятие 4(6ч.)[3,3,8]** Неэмпирические методы квантовой химии.
- 5. Занятие 5(4ч.)[5,6,7]** Применение методов УФ-, ИК-, ЯМР-спектроскопии для исследования закономерностей протекания химических реакций.
- 6. Занятие 6(4ч.)[3]** Масс-спектрометрия и её применение для исследования органических и неорганических соединений.

Самостоятельная работа (96ч.)

- 1. Конспектирование отдельных тем(8ч.)[3,4]**
- 2. Подготовка к лекциям(8ч.)[1]**
- 3. Подготовка к практическим занятиям(12ч.)[1,3,5,6,7,8]**
- 4. Выполнение расчётного задания(20ч.)[2,3,5,6,7,8]**
- 5. Подготовка к контрольным опросам(12ч.)[3,4,5,6,7,8]**
- 6. Подготовка к экзамену(36ч.)[3,4,5,6,7,8]**

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

Для каждого обучающегося обеспечен индивидуальный неограниченный доступ к электронно-библиотечным системам: Лань, Университетская библиотека он-лайн, электронной библиотеке АлтГТУ и к электронной информационно-образовательной среде:

1. Протопопов А.В. Визуализация химических структур и молекулярное моделирование (методическое пособие)/ электронная библиотека АлтГТУ [Электронный ресурс]: Учебно-методическое пособие.— Электрон. дан.— Барнаул: АлтГТУ, 2017.- 44 с.— Режим доступа: http://new.elib.altstu.ru/eum/download/ht/Protopopov_viz.pdf

2. Коньшин В.В., Протопопов А.В. Методические рекомендации к расчетному заданию по молекулярному моделированию. [Электронный ресурс]: Методические указания.— Электрон. дан.— Барнаул: АлтГТУ, 2015.— Режим доступа: http://new.elib.altstu.ru/eum/download/ht/protopopov_mm_rz.pdf

6. Перечень учебной литературы

6.1. Основная литература

3. Сутягин, В.М. Физико-химические методы исследования полимеров [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.М. Сутягин, А.А. Ляпков. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 140 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/99212>. — Загл. с экрана.

4. Вершинин, В. И. Планирование и математическая обработка результатов химического эксперимента : учебное пособие / В. И. Вершинин, Н. В. Перцев. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2019. — 236 с. — ISBN 978-5-8114-4120-4 // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/115525> (дата обращения: 04.05.2020).

6.2. Дополнительная литература

5. Чемерис М.М., Коньшин В.В., Шамков Ю.В. Физико-химические методы исследования строения мономеров и полимеров: Курс лекций в 3-х частях. Часть 1. Электронная спектроскопия./Алт.гос.техн.ун-т им. И.И.Ползунова.- Барнаул:

Изд-во АлтГТУ, 2005.-40 с. (электронная библиотека АлтГТУ).
<http://elib.altstu.ru/eum/download/tppie/temeris1.pdf>

6. Коньшин В.В., Чемерис М.М., Шамков Ю.В. Физико-химические методы исследования строения мономеров и полимеров: Курс лекций в 3-х частях. Часть 2. Колебательная спектроскопия./Алт.гос.техн.ун-т им. И.И.Ползунова.- Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2005.- 51 с. (электронная библиотека АлтГТУ).
<http://elib.altstu.ru/eum/download/tppie/konshin-2.pdf>

7. Беушева О.С., Чемерис М.М., Коньшин В.В. Физико-химические методы исследования строения мономеров и полимеров: Курс лекций в 3-х частях. Часть 3. ЯМР-спектроскопия./Алт.гос.техн.ун-т им. И.И.Ползунова.- Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2011.- 77 с. (электронная библиотека АлтГТУ)
http://elib.altstu.ru/eum/download/tppie/Konshin_jamr.pdf

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

8. <http://chemnet.ru>

9. <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

8. Фонд оценочных материалов для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Содержание промежуточной аттестации раскрывается в комплекте контролирующих материалов, предназначенных для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, которые хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном виде и в ЭИОС.

Фонд оценочных материалов (ФОМ) по дисциплине представлен в приложении А.

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Для успешного освоения дисциплины используются ресурсы электронной информационно-образовательной среды, образовательные интернет-порталы, глобальная компьютерная сеть Интернет. В процессе изучения дисциплины происходит интерактивное взаимодействие обучающегося с преподавателем через личный кабинет студента.

№пп	Используемое программное обеспечение
1	LibreOffice
2	Windows
3	Антивирус Kaspersky

№пп	Используемые профессиональные базы данных и информационные справочные системы
1	Бесплатная электронная библиотека онлайн "Единое окно к образовательным ресурсам" для студентов и преподавателей; каталог ссылок на образовательные интернет-ресурсы (http://Window.edu.ru)
2	Национальная электронная библиотека (НЭБ) — свободный доступ читателей к фондам российских библиотек. Содержит коллекции оцифрованных документов (как открытого доступа, так и ограниченных авторским правом), а также каталог изданий, хранящихся в библиотеках России. (http://нэб.рф/)

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

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы
учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа
учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций
учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа
учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации
помещения для самостоятельной работы

Материально-техническое обеспечение и организация образовательного процесса по дисциплине для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с «Положением об обучении инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья».