

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

СОГЛАСОВАНО

Директор ИнБиоХим
Ю.С. Лазуткина

Рабочая программа дисциплины

Код и наименование дисциплины: Б1.О.2 «Теоретические и экспериментальные методы исследования»

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

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

Статус дисциплины: обязательная часть

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 индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Содержание компетенции	Индикатор	Содержание индикатора
УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	УК-1.1	Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
		УК-1.2	Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации
		УК-1.3	Разрабатывает стратегию действий, принимает конкретные решения для ее реализации
ОПК-1	Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок	ОПК-1.1	Способен организовывать самостоятельную и (или) коллективную научно-исследовательскую работу
		ОПК-1.2	Разрабатывает планы и программы проведения научных исследований и технических разработок
ОПК-2	Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты	ОПК-2.1	Использует современные приборы и методики проведения экспериментов
		ОПК-2.2	Способен организовывать эксперименты и испытания

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 обучающегося с преподавателем (час)
	Лекции	Лабораторные работы	Практические занятия	Самостоятельная работа	
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)

Анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода

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 ¹³C использованием программ ACD Labs (CNMR, HNMR) и Chem Draw Ultra 9.

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 неорганических соединений и их систем по составляющим 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. Разработка планов и программ проведения научных исследований при изучении свойств органических веществ

2. Занятие 2(6ч.)[8] Варианты решения методов квантовой химии.

3. Занятие 3(6ч.)[3,8] Полуэмпирические методы квантовой химии

4. Занятие 4(6ч.)[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.

Современные приборы и методики

6. Занятие 6(4ч.)[3] Масс-спектрометрия и её применение для исследования органических и неорганических Организация проведения экспериментов и испытаний, обработка и анализ результатов

Самостоятельная работа (96ч.)

1. Конспектирование отдельных тем(16ч.)[3,4]
2. Подготовка к лекциям(8ч.)[1]
3. Подготовка к практическим занятиям(12ч.)[1,3,5,6,7,8]
4. Выполнение расчётного задания(12ч.)[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. 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. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/115525> (дата обращения: 21.12.2020). – Режим доступа: для авториз. пользователей.

6. Спектральные методы анализа. Практическое руководство : учебное пособие / В. И. Васильева, О. Ф. Стоянова, И. В. Шкутина, С. И. Карпов ; под редакцией В. Ф. Селемеева, В. Н. Семенова. – Санкт-Петербург : Лань, 2014. – 416 с. – ISBN 978-5-8114-1638-7. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com/book/50168> (дата обращения: 21.12.2020). – Режим доступа: для авториз. пользователей.

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.

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	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 учебных занятий
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».