

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**

<b>Статус</b>	<b>Должность</b>	<b>И.О. Фамилия</b>
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 <sup>1</sup>H и с ЯМР <sup>13</sup>C 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](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](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](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.

<b>№пп</b>	<b>Используемое программное обеспечение</b>
1	LibreOffice
2	Windows
3	Антивирус Kaspersky

<b>№пп</b>	<b>Используемые профессиональные базы данных и информационные справочные системы</b>
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. ( <a href="http://нэб.рф/">http://нэб.рф/</a> )

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

<b>Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы</b>
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».