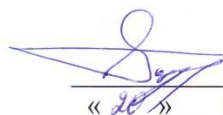


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Казанский национальный исследовательский технологический  
университет»  
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по УР



Бурмистров А.В.  
« 26 » 06 2019 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

Б1.В.ДВ.9.1 по дисциплине «Компьютерная химия»

Направление подготовки **18.03.01 – «Химическая технология»**

Профиль подготовки **Технология неорганических веществ**

Квалификация выпускника **БАКАЛАВР**

Форма обучения **ЗАОЧНАЯ**

Институт, факультет **Нефти, химии и нанотехнологий, факультет  
химических технологий**

Кафедра-разработчик рабочей программы **Технология неорганических  
веществ и материалов**

Курс 4, семестр 7

Курс 4, семестр 8

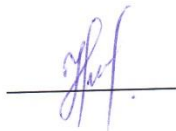
| Лекции                 | Часы   |        | Зачетные единицы |        |
|------------------------|--------|--------|------------------|--------|
|                        | 7 сем. | 8 сем. | 7 сем.           | 8 сем. |
| Лекции                 | 2      | 4      |                  |        |
| Практические занятия   |        |        |                  |        |
| Лабораторные занятия   |        | 4      |                  |        |
| Самостоятельная работа | 7      | 87     |                  |        |
| Форма аттестации Зачет |        | 4      |                  |        |
| Всего                  | 108    |        | 0,25             | 2,75   |

Казань, 2019 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования № 1005 от 11.08.2016 по направлению 18.03.01 «Химическая технология» для профиля «Технология неорганических веществ», на основании учебного плана набора обучающихся 2019 года.

Разработчик программы

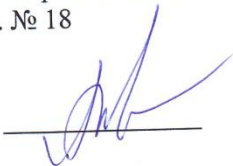
Доцент каф. ТНВМ



Нажарова Л.Н.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ТНВМ, протокол от 15.06.2019г. № 18

Зав. кафедрой

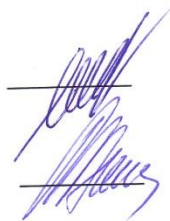


Хапρινов А.И.

### УТВЕРЖДЕНО

Протокол заседания методической комиссии факультета Химических технологий, к которому относится кафедра-разработчик РП от 20.06.2019 г. №9

Председатель комиссии, доцент



Виноградова С.С.

Нач. УМЦ, доцент

Китаева Л.А.

### **1. Цели освоения дисциплины**

Целями освоения дисциплины «Компьютерная химия» являются:

- а) формирование знаний о компьютерных технологиях и программных продуктах для химической технологии
- б) получение навыков работы с программными продуктами на ПК.

### **2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы**

Дисциплина «Компьютерная химия» относится к вариативной; дисциплины по выбору ООП и формирует у бакалавров по направлению подготовки «Химическая технология» набор знаний, умений, навыков и компетенций, необходимых для выполнения производственно-технологической и научно-исследовательской деятельности.

Для успешного освоения дисциплины «Компьютерная химия» бакалавр по направлению подготовки «Химическая технология» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

- а) Б1.Б.6 Математика.
- б) Б1.Б.7 Информатика.
- в) Б1.Б.10 Общая и неорганическая химия.
- г) Б1.Б.19 Общая химическая технология.
- д) Б1.В.ОД.2 Вычислительная математика.

Знания, полученные при изучении дисциплины «Компьютерная химия» могут быть использованы при прохождении преддипломной практики и выполнении выпускной квалификационной работы.

### **3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины**

ОПК–1 способностью и готовностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности;

ПК–2 готовностью применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования;

ПК–16 способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования.

б) навыками работы с программными продуктами на персональных компьютерах.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

| №<br>п/<br>п     | Раздел дисциплины                                                                            | Семестр | Виды учебной работы (в часах) |                                |                     |      | Информационные и другие образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса | Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам |
|------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|---------|-------------------------------|--------------------------------|---------------------|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
|                  |                                                                                              |         | Лекции                        | Семинар (Практические занятия) | Лабораторные работы | СРС  |                                                                                                              |                                                                        |
| 1                | Современное состояние компьютерной техники и компьютерных технологий                         | 7       | 2                             | -                              |                     | 7    |                                                                                                              | Собеседование                                                          |
| 2                | Программные продукты для химической технологии.<br><br>УМП для химической технологии         | 8       | 1                             | -                              |                     | 34   | Программа EXCEL<br>УМП ChemCad<br>И др.                                                                      | Контрольная работа<br>Сдача<br><br>лабораторных работ<br>Тест          |
| 3                | Исследование и проектирование химико-технологических процессов и аппаратов с применением УМП | 8       | 2                             | -                              | 4                   | 33   | УМП ChemCad                                                                                                  | Контрольная работа<br>Сдача<br>лабораторных работ<br>Тест              |
| 4                | Обзор пакетов прикладных программ для расчета свойств и состояний молекул                    | 8       | 1                             | -                              |                     | 10   |                                                                                                              | Реферат                                                                |
| 5                | Информационные сети и системы                                                                | 8       |                               |                                |                     | 10   |                                                                                                              | Реферат                                                                |
|                  | Итого                                                                                        |         | 2+4                           |                                | 4                   | 7+87 |                                                                                                              | 108                                                                    |
| Форма аттестации |                                                                                              |         |                               |                                |                     |      |                                                                                                              | Зачет                                                                  |

### 5. Содержание лекционных занятий по темам

| № п/п | Раздел дисциплины                                                                            | Часы     | Тема лекционного занятия                                                                                                                                                    | Формируемые компетенции |
|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|
| 1     | Современное состояние компьютерной техники и компьютерных технологий                         | 2        | Обзор современного уровня компьютерной техники и состояния компьютерных технологий. Программные продукты.                                                                   | ОПК-1, ПК-2, ПК-16      |
| 2     | Программные продукты для химической технологии. УМП для химической технологии                | 1        | Текстовые, графические, табличные редакторы, Их возможности и применения для решения научных и прикладных задач химической технологии. Универсальные моделирующие программы | ОПК-1, ПК-2, ПК-16      |
| 3     | Исследование и проектирование химико-технологических процессов и аппаратов с применением УМП | 2        | Программа ChemCad. Проектирование химико-технологических процессов с применением программы ChemCad.                                                                         | ОПК-1, ПК-2, ПК-16      |
| 4     | Обзор пакетов прикладных программ для расчета свойств и состояний молекул.                   | 1        | Обзор возможностей прикладных программ для расчета молекул и химических реакций. квантово-химических расчетов молекул                                                       | ОПК-1, ПК-2, ПК-16      |
|       | <b>ИТОГО</b>                                                                                 | <b>4</b> |                                                                                                                                                                             |                         |

#### Содержание лекций по дисциплине

Обзор современного уровня и состояния компьютерной техники и компьютерных технологий. Программные продукты.

Универсальные моделирующие программы, используемые в химической технологии. Структура УМП, задачи решаемые с применением УМП, проблемы и перспективы их развития.

Работа с формулами, таблицами, диаграммами, статистическая обработка данных. Обзор графических программных продуктов.

Исследование и проектирование химико-технологических процессов с применением программы ChemCad. Основные сведения о программе, ее возможности. Требования программы, загрузка системы, режимы работы системы, структура окна, начало и завершение работы. Режим графического построения. Основные возможности программы для построения графических схем химико-технологических процессов. Режим моделирования технологического процесса.

Решение задач расчета материального баланса разделения смеси, баланса абсорбции, расчет кинетических параметров реактора с применением пакета ChemCad.

Обзор пакетов расчетов свойств и состояний молекул и химических реакций. Современные информационные технологии. Электронные базы данных. Информационные сети, интернет. Способы и формы распространения информации. Защита информации в компьютерных сетях.

#### **6. Содержание практических/семинарских занятий** (не предусмотрены рабочим планом)

#### **7. Содержание лабораторных занятий**

Цель проведения лабораторных занятий – развить навыки использования современных информационных технологий, компьютерных технологий и прикладных программных средств для решения задач химической технологии.

| <b>N<br/>n/p</b> | <b>Раздел дисциплины</b>                                                                     | <b>Часы</b> | <b>Наименование<br/>лабораторной работы</b>             | <b>Формируемые<br/>компетенции</b> |
|------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|---------------------------------------------------------|------------------------------------|
| 1                | Исследование и проектирование химико-технологических процессов и аппаратов с применением УМП | 4           | 1. Графические и аналитические возможности УМП ChemCad. | ОПК -1<br>ПК-2<br>ПК-16            |
|                  | <b>ИТОГО</b>                                                                                 | <b>4</b>    |                                                         |                                    |

Лабораторные работы проводятся в компьютерном классе с использованием ПК.

#### **8. Самостоятельная работа бакалавра**

| <b>N<br/>n/p</b> | <b>Темы, выносимые на самостоятельную работу</b>                                  | <b>часы</b> | <b>Форма СРС</b>                                                                        | <b>Формируемые<br/>компетенции</b> |
|------------------|-----------------------------------------------------------------------------------|-------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------|
| <b>1</b>         | История и развитие компьютерных технологий и их современное состояние             | 7           | Подготовка к собеседованию                                                              | ОПК -1<br>ПК-2<br>ПК-16            |
| <b>2</b>         | Программные продукты для химической технологии:<br>Программы периодических таблиц | 34          | Выполнение контрольной работы.<br>Подготовка к сдаче зачета по дисциплине, подготовка к | ОПК -1<br>ПК-2<br>ПК-16            |

|          |                                                                                                                                                                                                                             |           |                                                                                                                      |                         |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|
|          | Возможности табличных редакторов<br>Возможности ChemOffice<br>Подготовки и переработки газовых и нефтяных систем<br>Конвертация данных<br>Проведения виртуальных лабораторных работ.<br>И другие программы продукты         |           | выполнению тестового задания                                                                                         |                         |
| <b>3</b> | Исследование и проектирование химико-технологических процессов и аппаратов с применением УМП:<br>Области применения УМП<br>Графические интерфейсы УМП<br>Моделирование ХТС с применением УМП<br>Специальные возможности УМП | 33        | Выполнение контрольной работы.<br>Подготовка к сдаче зачета по дисциплине, подготовка к выполнению тестового задания | ОПК -1<br>ПК-2<br>ПК-16 |
| <b>4</b> | Обзор пакетов прикладных программ для расчета свойств и состояния молекул:<br>Моделирование химических соединений<br>Программы вычислительной химии, квантовой химии                                                        | 10        | Выполнение контрольной работы.<br>Подготовка к сдаче зачета по дисциплине, подготовка к выполнению тестового задания | ОПК -1<br>ПК-2<br>ПК-16 |
| <b>5</b> | Информационные сети и системы:<br>Поиск, сбор, хранение данных<br>Информационно-коммуникационные технологии<br>Защита информации в КС                                                                                       | 10        | Выполнение контрольной работы.<br>Подготовка к сдаче зачета по дисциплине, подготовка к выполнению тестового задания | ОПК -1<br>ПК-2<br>ПК-16 |
|          | <b>ИТОГО</b>                                                                                                                                                                                                                | <b>87</b> |                                                                                                                      |                         |

### ***9. Использование рейтинговой системы оценки знаний.***

При оценке результатов деятельности обучающихся в рамках дисциплины Компьютерная химия используется рейтинговая система. Рейтинговая оценка формируется на основании текущего и промежуточного контроля. Максимальное и минимальное количество баллов по различным видам учебной работы описано в положении о рейтинговой системе.

Максимальный рейтинг бакалавра по дисциплине  $R_{\text{дис}}$  равен 100 баллам.

Объем и уровень усвоения студентами учебного материала дисциплины «Компьютерная химия» оцениваются комплексной рейтинговой оценкой, включающей в себя:

$$R_{\text{тек}} = R_{\text{пром}} + H + K,$$

**-результаты промежуточного контроля ( $R_{\text{пром}}$ )** - оценка теоретических знаний, практических умений и навыков, проявленных студентами на всех формах занятий в период освоения дисциплины. Рейтинг  $R_{\text{пром}}$  определяется как сумма баллов полученных за все лабораторные работы.

**- результаты контрольных испытания ( $K$ )** к которым в данном случае относятся контрольной работы, тест.

**-выполнение нетиповых заданий повышенной сложности ( $H$ ):** участие в олимпиадах, научно-исследовательской работе кафедры, или выполнение других работ, углубляющих знания по данной дисциплине. За выполнение таких заданий (которые не являются обязательными, и выполняются только по желанию) могут начисляться дополнительные (премиальные) аттестационные баллы. Выдача нетиповых заданий студентам осуществляется в начале изучения дисциплины. Зачет работ производится на последней неделе после всех запланированных аттестационных работ.

При изучении дисциплины компьютерная химия предусмотрено выполнение 1 лабораторных работ, 1 контрольных работ, и выполнение тестового задания по материалам лекционного и лабораторного курса.

За эти контрольные точки студент может получить минимальное и максимальное количество баллов (см. таблицу).

Таблица. Распределение баллов по основным формам работы бакалавра.

| Оценочные средства    | Минимум<br>баллов | Максимум<br>баллов |
|-----------------------|-------------------|--------------------|
| Лабораторная работа 1 | 20                | 30                 |
| Контрольная работа №1 | 20                | 35                 |
| Тест                  | 20                | 35                 |
| Итого                 | 60                | 100                |

В ходе изучения дисциплины Компьютерная химия возможно *по желанию студента* выполнение нетиповых индивидуальных заданий. Содержание заданий может быть связано с научно-исследовательской работой студента, выполнением проектных работ (или др. видов работ) и заключаться, например, в обработке собственных экспериментальных данных, построении схем лабораторных установок, построении технологических схем, освоении режима моделирования какого-либо аппарата (дробилки, мельницы, печи и др.) с применением УМП, выполнении квантово-химических расчетов и других заданий. Задания могут выдаваться преподавателем, ведущим занятия по дисциплине «Компьютерная химия», или научным руководителем курсовых и дипломных работ бакалавра.

Предмет считается усвоенным и проставляется отметка о зачете, если студентом выполнены все текущие контрольные точки и сумма баллов, набранных за текущую работу в семестре, не менее 60.



Таблица – Оценки успеваемости по дисциплине

| Интервал баллов<br>рейтинга       | Оценка  |
|-----------------------------------|---------|
| $0 \leq R_{\text{дис}} < 60$      | Незачет |
| $60 \leq R_{\text{дис}} \leq 100$ | Зачет   |

## 10. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

### 10.1. Основная литература

При изучении дисциплины «Компьютерная химия» в качестве основных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу.

| Основные источники информации                                                                                                                                                                                           | Кол-во экз.                                                                                                                                                                                           |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. Зиятдинов, Н. Н. Системный анализ химико-технологических процессов с использованием программы CHEMCAD [Учебники] : учеб.-метод. пособие / Казан. гос. технол. ун-т. — Казань, 2009. — 212 с. ISBN 978-5-7882-0806-0. | 160 экз. в УНИЦ КНИТУ<br>ЭБС Лань<br><a href="https://e.lanbook.com/book/13329">https://e.lanbook.com/book/13329</a> .<br>Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ       |
| 2. Козлов А. Ю. Статистический анализ данных в MS Excel : учеб. пособие / А.Ю. Козлов, В.С. Мхитарян, В.Ф. Шишов. – М.: ИНФРА-М, 2017.                                                                                  | ЭБС «Znanium»<br><a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=858510">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=858510</a><br>Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ |

В качестве дополнительных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

| Дополнительные источники информации                                                                                                                                                                                              | Кол-во экз.                                                                                                                                                                                           |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1. Математическое моделирование химико-технологических систем с использованием программы ChemCad / Учебно-методическое пособие / Казан. гос. технол. ун-т. Сост.: Зиятдинов Н.Н., Лаптева Т.В., Рыжов Д.А., Казань, 2008. -159с. | ЭБС Лань<br><a href="http://e.lanbook.com//book/13290">http://e.lanbook.com//book/13290</a><br>Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ                                  |
| 2. Конакова, И. П. Компьютерная графика. КОМПАС и AutoCAD: учебное пособие / И. П. Конакова, И. И. Пирогова. — Екатеринбург: Уральский федеральный университет, ЭБС АСВ, 2015. — 148 с. — ISBN 978-5-7996-1403-4.                | ЭБС «IPRbooks»<br><a href="http://www.iprbookshop.ru/68436.htm">http://www.iprbookshop.ru/68436.htm</a><br>Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ                      |
| 3. Интернет-технологии : учеб. пособие / С.Р. Гуриков. — М. : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2017. — 184 с                                                                                                                                     | ЭБС «Znanium»<br><a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=908584">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=908584</a><br>Доступен из любой точки интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ |
| 4. Нарышкин Д. Г. Химическая термодинамика с Mathcad. Расчетные задачи: Учебное пособие / Д.Г.Нарышкин, М.: ИЦ РИОР, НИЦ ИНФРА-М, 2016. - 199 с.: ISBN978-5-369-01479-0                                                          | ЭБС «Znanium»<br><a href="http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=503896">http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=503896</a><br>Доступен из любой точки Интернета после регистрации с IP адреса КНИТУ |

### **10.3 Электронные источники информации**

При изучении дисциплины «Компьютерная химия»

рекомендуется использование электронных источников информации:

1. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ. – <http://ruslan.kstu.ru/>
2. ЭБС «ЮРАЙТ». – <http://www.biblio-online.ru/>
3. ЭБС «Консультант студента» – <http://www.studentlibrary.ru/>
4. ЭБС «Лань» <https://e.lanbook.com/>
5. ЭБС «Znanium.com» <https://znanium.com/>
6. ЭБС «IPRbooks.com» <https://iprbookshop/>

**Согласовано:**

**УНИЦ КНИТУ**



### **10.4 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы**

1. Научная электронная библиотека (РУНЭБ). – <http://elibrary.ru>.
2. Научно-технический журнал «Химическая промышленность сегодня». Сайт журнала «Химическая промышленность сегодня». – Доступ свободный: <http://www.chemprom.org/>.
3. Журнал «Известия высших учебных заведений. Серия «Химия и химическая технология»». Сайт журнала «Известия высших учебных заведений. Серия «Химия и химическая технология»». – Доступ свободный: <http://journals.isuct.ru/ctj/>
4. Электронный справочный портал ИНФОРМИО» <http://www.informio.ru/>

### **11. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины**

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся и итоговой (государственной итоговой) аттестации разрабатываются согласно положению о Фондах оценочных средств, рассматриваются как составная часть рабочей программы и оформляются отдельным документом.

## **12. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля).**

### **1. Лекционные занятия:**

-аудитория, оснащенная презентационной техникой - проектор, экран, компьютер/ноутбук;

### **2. Лабораторные занятия:**

Рабочие места преподавателя, и студентов оснащенные компьютером с доступом в Интернет.

Лицензированное программное обеспечение и свободно распространяемое программное обеспечение, используемое в учебном процессе при освоении дисциплины «Компьютерная химия»:

1. Офисные и деловые программы MS Office 2007 Professional Russian.

2. САПР Aspen HYSYS ONE Process Optimization Software – Standard u8.5

## **13. Образовательные технологии**

Количество часов лекционных занятий, проводимых в интерактивной форме - лабораторных занятий – 4 ч.

В качестве интерактивных форм всех лабораторных занятий используется *работа на ЭВМ с программными продуктами* для решения задач согласно учебного плана

*работа в малой группе* для совместного решения в команде поставленной задачи.