

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 25.10.2023 16:21:35
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ

Врио проректора по учебной
и методической работе

_____ Б.В.Пекаревский

«23» марта 2021 г.

Рабочая программа дисциплины
ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ ХИМИЧЕСКОГО
ЭКСПЕРИМЕНТА»

Направление подготовки

18.04.01 Химическая технология

Направленность программы магистратуры

Химическая технология продуктов тонкого органического синтеза

Квалификация

Магистр

Форма обучения

Очная

Факультет **химической и биотехнологии**

Кафедра **химии и технологии синтетических биологически активных веществ**

Санкт-Петербург

2021

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Заведующий кафедрой		Профессор Крутиков В.И.
Доцент		Щадилова Е.Е.

Рабочая программа дисциплины «Основы математической обработки результатов химического эксперимента» обсуждена на заседании кафедры химии и технологии синтетических биологически активных веществ
протокол от «10» марта 2021 № 8
Заведующий кафедрой

В.И. Крутиков

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химической и биотехнологии
протокол от «18» марта 2021 № 8

Председатель

М.В. Рутто

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химическая технология»		М.В. Рутто
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И. Богданова
Начальник учебно-методического управления		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	06
3. Объем дисциплины	06
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Занятия лекционного типа.....	07
4.3. Занятия семинарского типа.....	08
4.3.1. Семинары, практические занятия	08
4.3.2. Лабораторные занятия.....	08
4.4. Самостоятельная работа.....	08
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	09
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	09
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины	09
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	09
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	09
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	10
10.2. Программное обеспечение.....	10
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	10
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы	10
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	10

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

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

В результате освоения образовательной программы магистратуры обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ПК-6 Планирование, моделирование и проведение полного цикла научно-технической эксперимента	ПК-6.1 Разработка алгоритма стандартизации эксперимента по заданной тематике	Знать: механизмы стандартизации разработки алгоритмов химического эксперимента (ЗН-1); Уметь: моделировать направление и результаты химического эксперимента (У-1) Владеть: заданными способами обработки результатов химического эксперимента (Н-1)

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина является факультативом (ФТД. 02) и изучается на 1 курсе в 2 семестре.

В методическом плане дисциплина «Основы математической обработки результатов химического эксперимента» опирается на элементы компетенций, сформированные в бакалавриате. Полученные в процессе изучения дисциплины «Основы математической обработки результатов химического эксперимента» знания, умения и навыки могут быть использованы при прохождении производственной практики, а также при выполнении магистерской диссертации.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	2/ 72
Контактная работа с преподавателем:	46
занятия лекционного типа	14
занятия семинарского типа, в т.ч.	-
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	32 (8)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	-
курсовое проектирование (КП)	-
КСР	-
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	26
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, Зачет)	Зачет

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1	Введение	3	6	-	-	ПК-6	ПК-6.1
2	Представление химических формул в виде, удобном для компьютера. Пакеты программ ISIS Draw, ChemWin, ChemDraw	2	5	-	6	ПК-6	ПК-6.1
3	Оптимизация структуры химического соединения с помощью пакета программ HyperChem	2	5	-	5	ПК-6	ПК-6.1
4	Пакет программ PASS для предсказания вида биологической активности и токсичности	2	5	-	5	ПК-6	ПК-6.1
5	Молекулярный докинг	2	5	-	5	ПК-6	ПК-6.1
6	Возможности пакета программ Microcal Origin	3	6	-	5	ПК-6	ПК-6.1

4.2. Занятия лекционного типа

№ раздела дисцип	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	Введение. Представление химических формул в виде, удобном для компьютера	3	ЛВ
2	Пакет программ ISIS Draw, ChemWin, ChemDraw. Особенности интерфейса, специальные возможности, интеграция в текстовые редакторы	2	ЛВ, РД
3	Оптимизация структуры химического соединения с помощью пакета программ HyperChem. Особенности интерфейса HyperChem, специальные возможности	2	ЛВ, Д

№ раздела дисцип	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
4	Применение пакета программ PASS для предсказания вида биологической активности и токсичности органических соединений	2	ЛВ, Д
5	Молекулярный докинг	2	ЛПК, РД
6	Возможности пакета программ Microcal Origin. Особенности интерфейса, специальные возможности, интеграция в текстовые редакторы	3	ЛВ, Д

4.3. Занятия семинарского типа

4.3.1. Семинары, практические занятия

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Инновационная форма
		всего	в том числе на практическую подготовку	
1	Пакет программ ISIS Draw. Представление химических формул в виде, удобном для ввода в текстовые редакторы, и использование в других программах.	6	2	МГ
2	Пакеты программ ChemWin, ChemDraw для молекулярного моделирования	5	2	МГ
3	Оптимизация структуры химического соединения с помощью пакета программ HyperChem. Особенности интерфейса HyperChem, специальные возможности	5	1	МГ, Ф
4	Применение пакета программ PASS для предсказания вида биологической активности и токсичности органических соединений	5	1	МГ
5	Молекулярный докинг. Предсказание воздействия органического соединения на биомишень	5	1	МГ
6	Применение пакета программ Microcal Origin для математической обработки результатов химического и физического экспериментов	6	1	МГ

4.3.2. Лабораторные работы

Лабораторные занятия по данной дисциплине учебным планом не предусмотрены

4.4. Самостоятельная работа обучающихся

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Пакет программ ISIS Draw. Представление химических формул в виде, удобном для ввода в текстовые редакторы, и использование в других программах. Пакеты программ ChemWin, ChemDraw для молекулярного моделирования	6	Устный опрос
3	Оптимизация структуры химического соединения с помощью пакета программ HyperChem. Особенности интерфейса HyperChem, специальные возможности	5	Устный опрос
4	Применение пакета программ PASS для предсказания вида биологической активности и токсичности органических соединений	5	Устный опрос
5	Молекулярный докинг. Предсказание воздействия органического соединения на биомишень	5	Устный опрос
6	Применение пакета программ Microcal Origin для математической обработки результатов химического и физического экспериментов	5	Устный опрос

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

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <https://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета.

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень зачено освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями)

При сдаче зачета, студент получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Пример варианта вопросов на Зачете:

Вариант № 1

1. Изобразите предлагаемые преподавателем формулы с помощью любого редактора химических формул.
2. Рассчитайте физико-химические параметры предложенных соединений с помощью пакета программ HyperChem.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – «зачтено».

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Граник, В.Г. Лекарства: фармакологический, биохимический и химический аспекты / В. Г. Граник. Москва: Вузовская книга, 2006. - 407 с. ISBN 5-9502-0124-8.
2. Основы курсового и дипломного проектирования: учебное пособие / Г. П. Шапошников [и др.]; Ивановский государственный химико-технологический университет; Иваново, 2010. – 200 с. ISBN 978-5-9616-0361-3.
3. Солдатенков, А.Т. Пестициды и регуляторы роста: прикладная органическая химия / А.Т. Солдатенков, Н.М. Колядина, А. Ле Туан – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 223 с. ISBN 978-5-9963-0202-4.
4. Основы проектирования химических производств: учеб. Для вузов / под ред. А. И. Михайличенко. – Москва: ИКЦ «Академкнига», 2006.– 332 с. ISBN 5-94628-131-3
5. Краткий справочник физико-химических величин. Изд.одиннадцатое, испр. и дополн./ под ред. А.А. Равделя и А.М.Пономаревой – Москва: ООО «ТИД «Аз-book», 2009. – 240 с. ISBN 978-5-905034-03-0.
6. Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учебное пособие для вузов по спец. "Основные процессы химических производств и химическая кибернетика" / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – Москва: Академкнига, 2006. - 416 с. ISBN: 5-94628-268-9
7. Основы токсикологии: учебное пособие для вузов / П. П. Кукин, Н. Л. Пономарев, К. Р. Таранцева [и др.] - Москва : Высшая школа, 2008. - 279 с. ISBN 978-5-06-005717-1.
8. Фаддеев, М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента: учебное

пособие / М. А. Фаддеев. – Санкт-Петербург, Москва, Краснодар: Лань, 2008. - 117 с. ISBN 978-5-81114-0817-7.

б) электронные учебные издания:

1. Крутиков, В.И. Синтез, свойства и биологическая активность ароматических галогенкетонов: учебное пособие / В.И. Крутиков, В.В. Крутикова; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2014.- 48 с. СПбГТИ. Электронная библиотека. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

2. Крутиков, В.И. Особенности физиологического действия фосфорорганических соединений и их детоксикация: учебное пособие / В.И. Крутиков, В.В. Крутикова; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2008.- 80 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

3. Еркин, А.В. Способы синтеза и химической модификации некоторых реакционноспособных пиримидинов: учебное пособие / А.В. Еркин; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2014.- 17 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

4. Масленников, И.Г. Механизмы реакций органического синтеза (гетеролитические реакции): учебное пособие/ И.Г. Масленников; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2013. – 98 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

5. Масленников, И.Г. Основы проектирования производств органического синтеза: учебное пособие/ И.Г. Масленников, В.И. Крутиков, К.И. Еремин; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2015. – 132 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

6. Масленников, И.Г. Химия и технология пестицидов: учебное пособие/ И.Г. Масленников; Министерство образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Кафедра химии и технологии синтетических биологически активных веществ. – Санкт-Петербург: СПбГТИ(ТУ), 2016. – 123 с. URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 05.03.2021). – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

- учебный план, РПД и учебно-методические материалы:

<http://media.technolog.edu.ru>

- **Электронная библиотека СПбГТИ(ТУ) (на базе ЭБС «БиблиоТех»)**

Принадлежность – собственная СПбГТИ(ТУ).

Договор на передачу права (простой неисключительной лицензии) на использования результата интеллектуальной деятельности ООО «БиблиоТех»

ГК№0372100046511000114_135922 от 30.08.2011

Адрес сайта – <http://bibl.tti-gti.ru/>

Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как www.yandex.ru, www.google.ru, www.rambler.ru, www.yahoo.ru и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

С компьютеров института открыт доступ к:

www.elibrary.ru - eLIBRARY - научная электронная библиотека периодических изданий;

<http://e.lanbook.com> - Электронно-библиотечная система издательства «Лань», коллекции «Химия» (книги издательств «Лань», «Бином», «НОТ»), «Нанотехнологии» (книги издательства «Бином. Лаборатория знаний»);

www.consultant.ru - КонсультантПлюс - база законодательных документов по РФ и Санкт-Петербургу;

www.scopus.com - База данных рефератов и цитирования Scopus издательства Elsevier;

<http://webofknowledge.com> - Универсальная реферативная база данных научных публикаций Web of Science компании Thomson Reuters;

<http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>, <http://iopscience.iop.org/page/subjects> - Издательство ИОП (Великобритания);

www.oxfordjournals.org - Архив научных журналов издательства Oxford University Press;

<http://www.sciencemag.org/> - Полнотекстовый доступ к журналу Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS));

<http://www.nature.com> - Доступ к журналу Nature (Nature Publishing Group);

<http://pubs.acs.org> - Доступ к коллекции журналов Core + издательства American Chemical Society;

<http://journals.cambridge.org> - Полнотекстовый доступ к коллекции журналов Cambridge University Press.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине « Основы математической обработки результатов химического эксперимента» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;

серьезное отношение к изучению материала;

постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея знания по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

чтение лекций с использованием слайд-презентаций;

взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение

Microsoft Office (Microsoft Excel);

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.

Для проведения занятий в интерактивной форме, чтения лекций в виде презентаций, демонстрации видео материалов используется мультимедийная техника и компьютерный класс с персональными компьютерами.

Для проведения лабораторных и практических занятий используется следующее оборудование: дистилляторы, весы, центрифуга напольная, сушильный шкаф, морозильная камера, компьютер, ЯМР спектрометр, ИК спектрометр, дериватограф, УФ кабинет, рефрактометр, насос вакуумный, сушильный шкаф, муфельные печи, весы аналитические, спектрофотометр, прибор для определения температуры плавления, иономер, УФ-кабинет, рефрактометр, микроскоп. Лабораторная посуда: биологический. Стеклоаналитическая: колбы, мерные цилиндры, водоструйный насос, холодильник, чашки Петри, колба Бунзена, воронка Бюхнера, ртутный термометр.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебный процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Основы математической обработки результатов химического
эксперимента»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-6	Планирование, моделирование и проведение полного цикла научно-технической эксперимента	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

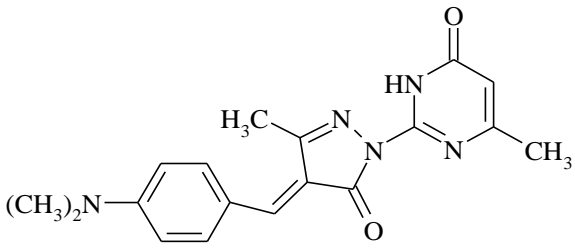
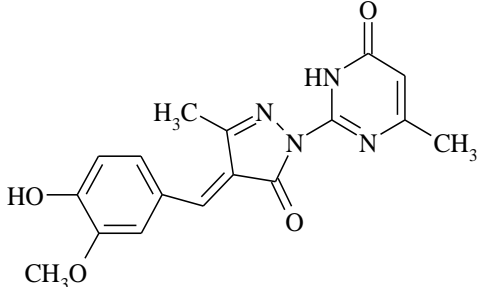
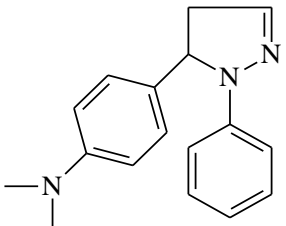
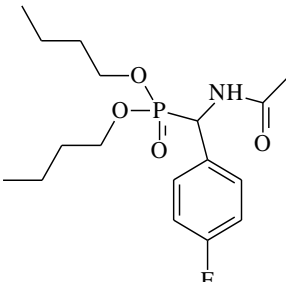
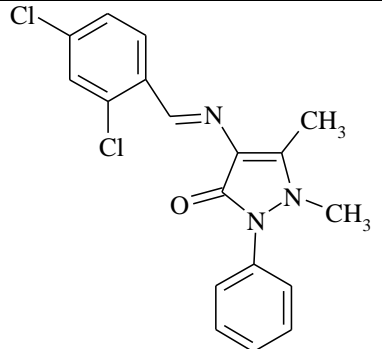
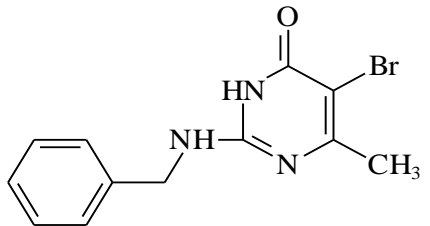
Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК-6.1 Разработка алгоритма стандартизации эксперимента по заданной тематике	Перечисляет механизмы разработки алгоритмов стандартизации химического эксперимента (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы №1-9 к зачету	Перечисляет с ошибками механизмы разработки алгоритмов стандартизации химического эксперимента с ошибками	Перечисляет механизмы разработки алгоритмов стандартизации химического эксперимента с наводящими вопросами	Правильно перечисляет механизмы разработки алгоритмов стандартизации химического эксперимента, сравнивает и анализирует
	Сопоставляет и делает выводы по моделированию и результатам химического эксперимента (У-1)	Правильные ответы на вопросы №1-9 к зачету	Сопоставляет и делает выводы по моделированию и результатам химического эксперимента с ошибками	Сопоставляет и делает выводы по моделированию и результатам химического эксперимента	Сопоставляет и делает глубокие выводы по моделированию и результатам химического эксперимента
	Демонстрирует владение различными способами обработки результатов химического эксперимента (Н-1)	Правильные ответы на вопросы №1-9 к зачету	Имеет слабые навыки владения различными способами обработки результатов химического эксперимента	Имеет навыки владения различными способами обработки результатов химического эксперимента, но допускает 1-2 ошибки	Демонстрирует уверенные навыки владения различными способами обработки результатов химического эксперимента

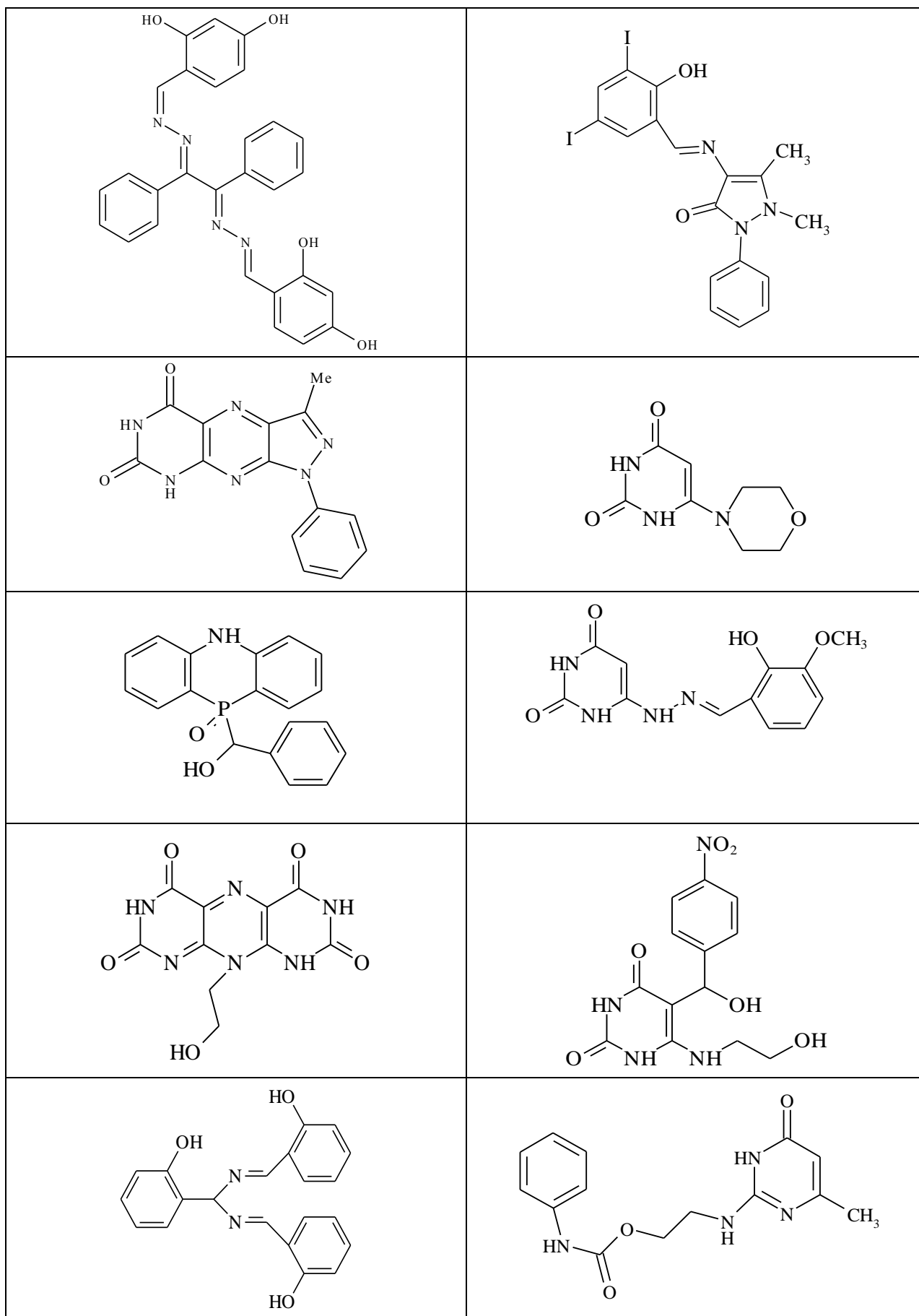
3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

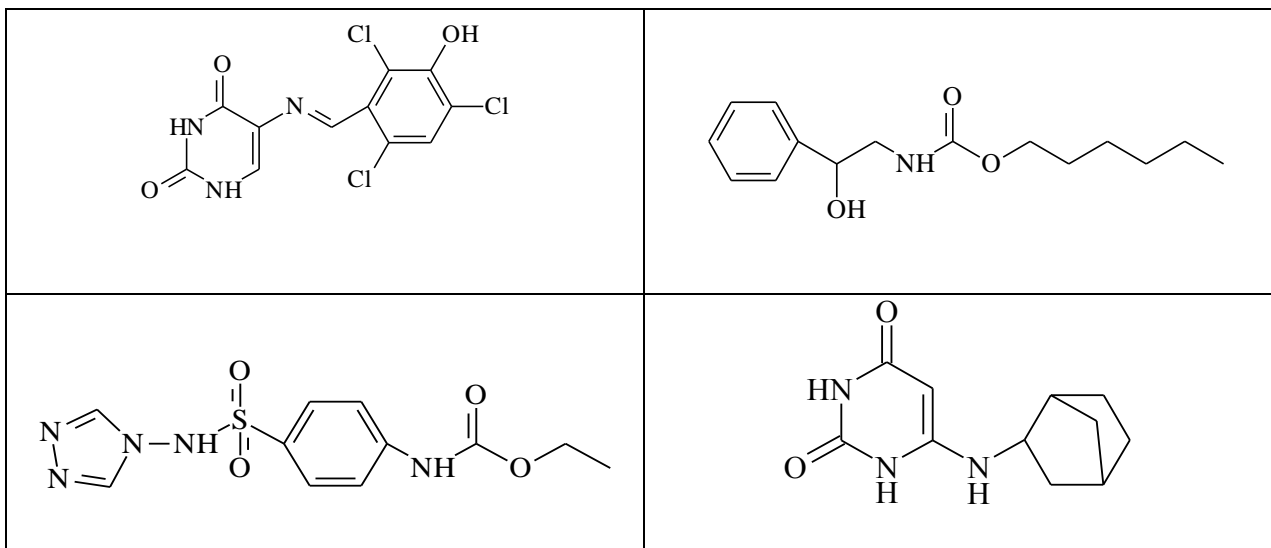
Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-2:

1. Каковы возможности пакета программ ISIS Draw?
2. Каковы возможности пакета программ ChemWin?
3. Каковы возможности пакета программ ChemDraw?
4. Каковы возможности пакета программ PASS?
5. Что такое молекулярный докинг?
6. Как построить график с помощью пакета программ Microcal Origin?
7. Изобразите предлагаемые преподавателем формулы с помощью любого редактора химических формул.
8. Рассчитайте физико-химические параметры предложенных соединений с помощью пакета программ HyperChem.
9. Предскажите вид биологической активности одного из представленных ниже соединений.

Перечень вариантов предлагаемых соединений:





При сдаче зачета, студент получает три вопроса из перечня, приведенного выше. Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

5. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПбГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.