

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 10.11.2023 17:44:11
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

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

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной и
методической работе

_____ Б.В.Пекаревский
« 28 » июня 2021 г.

**Рабочая программа дисциплины
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЁТА СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ
ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ АЗОТА**

Направление подготовки

18.05.01– Химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий

Направленность программы специалитета

№1 Химическая технология органических соединений азота

Квалификация

Инженер

Форма обучения

Очная

Факультет **инженерно-технологический**

Кафедра **химии и технологии органических соединений азота**

Санкт-Петербург

2021

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Учёное звание, Фамилия, инициалы
Профессор		Профессор Трифонов Р.Е.
Старший преподаватель		Павлюкова Ю.Н.

Рабочая программа дисциплины «Теоретические методы расчёта структуры и свойств органических соединений азота» обсуждена на заседании кафедры химии и технологии органических соединений азота
протокол от «31» мая 2021 №3
Заведующий кафедрой

А.А.Кирюшкин

Одобрено учебно-методической комиссией инженерно-технологического факультета
протокол от «24» июня 2021 № 9
Председатель

А.П. Сула

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель направления подготовки «химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий»		Т.В.Украинцева
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно- методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	5
3. Объем дисциплины	5
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	6
4.2. Занятия лекционного типа.....	6
4.3. Занятия семинарского типа	
4.3.1. Семинары, практические занятия.....	7
4.3.2. Лабораторные занятия.....	7
4.4. Самостоятельная работа.....	8
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	8
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	8
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	9
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	9
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	10
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	11
10.2. Программное обеспечение.....	11
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	11
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	11
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	11
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации...	12

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

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

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ПК-7 Способен прогнозировать взрывчатые свойства индивидуальных и смесевых энергонасыщенных веществ, исследовать структуру и свойства органических соединений азота с использованием современного оборудования и теоретических методов расчёта</p>	<p>ПК-7.6 Способность проводить расчёты структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами.</p>	<p>Знать: Основные теоретические методы расчётов в химии (3.7.6.1); Уметь: Проводить расчёты структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами (У.7.6.1); Владеть: Методами расчёта структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами. (В.7.6.1)</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина входит в часть, формируемую участниками образовательных отношений ФТД. Факультативные дисциплины, «Обязательная часть блока ФТД» (ФТД.О.02) и изучается на 5 курсе в 9 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Введение в специальность» и «Количественная теория реакций органических соединений азота». Полученные в процессе изучения дисциплины «Теоретические методы расчёта структуры и свойств органических соединений азота» знания, умения и навыки могут быть использованы при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	2/72
Контактная работа с преподавателем:	28
занятия лекционного типа	10
занятия семинарского типа, в т.ч.	18
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	18 (8)
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	-
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	44
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Зачёт

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. Общая классификация методов расчёта	2	2	-	4	ПК – 7.	ПК-7.6
2.	Задачи и применимость расчётных методов	2	1	-	4	ПК - 7	ПК-7.6
3.	Эмпирические методы (корреляционные методы, QSAR и проч.);	2	5	-	12	ПК - 7	ПК-7.6
4.	Молекулярная механика и молекулярная динамика (корпускулярные представления об атомах и молекулах);	2	5	-	12	ПК - 7	ПК-7.6
5.	Квантовая химия (решение уравнений квантовой механики с приближениями – нахождение волновой функции).	2	5	-	12	ПК - 7	ПК-7.6

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
1	Введение. Общая классификация методов расчёта. Эмпирические методы. Молекулярная механика и динамика. Квантовая химия.	2	Слайд-презентация
2	Задачи и применимость расчётных методов. Нахождение энергетического минимума системы. Нахождение энергетического максимума (переходного состояния). Прогноз свойств системы. Время расчёта и размер молекулы.	2	Слайд-презентация
3	Эмпирические методы (корреляционные методы, QSAR и проч.);	2	Слайд-презентация
4	Молекулярная механика и молекулярная динамика (корпускулярные представления об атомах и молекулах). Кривая потенциальной энергии	2	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	растяжения химической связи. Энергия реальной молекулы. Свойства поверхности потенциальной энергии. Составляющие потенциальной энергии. Наборы силовых полей и программные продукты.		
5	Квантовая химия (решение уравнений квантовой механики с приближениями – нахождение волновой функции). Квантование энергии. Корпускулярно-волновой дуализм. Соотношения неопределенностей. Волновая функция. Уравнение Шредингера. Метод молекулярных орбиталей. Методы квантовой химии.	2	Слайд-презентация

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Примечания
		всего	в том числе на практическую подготовку	
1	Введение. Общая классификация методов расчёта	2	1	Устный опрос Слайд-презентация
2	Задачи и применимость расчётных методов	1	1	Устный опрос Слайд-презентация
3	Эмпирические методы (корреляционные методы, QSAR и проч.);	5	2	Устный опрос Слайд-презентация
4	Молекулярная механика и молекулярная динамика (корпускулярные представления об атомах и молекулах);	5	2	Устный опрос Слайд-презентация
5	Квантовая химия (решение уравнений квантовой механики с приближениями – нахождение волновой функции).	5	2	Устный опрос Слайд-презентация

4.3.2. Лабораторные работы

Лабораторные занятия не предусмотрены

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Тема самостоятельной работы	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Введение. Общая классификация методов расчёта	4	Устный опрос Слайд-презентация
2	Задачи и применимость расчётных методов	4	Устный опрос Слайд-презентация
3	Эмпирические методы (корреляционные методы, QSAR и проч.);	12	Устный опрос Слайд-презентация
4	Молекулярная механика и молекулярная динамика (корпускулярные представления об атомах и молекулах);	12	Устный опрос Слайд-презентация
5	Квантовая химия (решение уравнений квантовой механики с приближениями – нахождение волновой функции).	12	Устный опрос Слайд-презентация

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

При чтении лекций используются материалы, представляемые в виде презентаций, с применением ресурса PowerPoint, включая анимационные режимы. Демонстрация - с помощью мультимедийного проектора, а также белой доски. В процессе обучения используются информационные материалы ведущих мировых производителей оборудования для производств малотоннажных химических продуктов.

В качестве учебных пособий для демонстрации условий применения аналитических методов на производстве может быть использован кафедральный стенд, моделирующий стадию нитрования ароматических субстратов серно-азотной нитрующей смесью, а также различные типы емкостных реакторов, моделей перемешивающих устройств, средства автоматического контроля. Для демонстрации работы микрореактора используются ресурсы кафедры оптимизации химических и биотехнологических производств СПбГТИ(ТУ).

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Современное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить пороговый уровень освоения предусмотренных элементов компетенций. Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачёта. К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Зачёт предусматривает проверку освоения предусмотренных элементов компетенций, и комплектуется двумя вопросами (заданиями) для проверки знаний, умений и навыков. При сдаче зачёта, студент получает билет, состоящий из 1-го вопроса (задания) из перечня вопросов по дисциплине, время подготовки студента к устному ответу – до 30 минут.

Оценка «зачтено» (пороговый уровень) ставится студенту, обнаружившему понимание учебного материала в объеме, необходимом для предстоящей работы по профессии, справляющемуся с выполнением заданий, предусмотренных программой практики, при наличии в содержании отчета и его оформлении небольших недочётов или недостатков, затруднениях при ответах на вопросы.

Пример варианта билета на зачёте:

Вариант №1

1. Задачи и применимость расчётных методов

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) печатные издания:

1. Трифонов, Р.Е. Моделирование структуры и свойств молекул методами молекулярной механики и молекулярной динамики: Учебное пособие / Р.Е Трифонов, В.А. Островский - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011. - 52 с. (ЭБ)

б) электронные учебные издания

1. Трифонов, Р.Е. Моделирование структуры и свойств молекул методами молекулярной механики и молекулярной динамики: Учебное пособие / Р.Е Трифонов, В.А. Островский - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011. - 52 с. (ЭБ)

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

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать интернет-ресурсы:

проводить поиск в системах: Scirus.com, SciFinder, Reaxys.

Государственная публичная научно-техническая библиотека. <http://www.gpntb.ru/>;

Учебный план РПД и учебно-методический материал; <http://media.technolog.edu.ru>

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

Федеральный портал «Российское образование» <http://www.edu.ru/>

Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» <http://school-collection.edu.ru/>

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>. ООО «Издательство «Лань».

«Научно-электронная библиотека eLibrary.ru». <http://elibrary.ru>. Государственная публичная научно-техническая библиотека. <http://www.gpntb.ru/>;

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Дисциплина обеспечена необходимой литературой и учебными пособиями. При чтении лекций используются презентации, слайды рисунки и схемы, представляемые с помощью мультимедийного проектора.

Лекционные, практические и лабораторные занятия проводятся в специализированных аудиториях и лабораториях. Лекционная аудитория оснащена мультимедийной системой с комплектом презентаций и видеофильмов.

Практические занятия проводятся в специализированной аудитории, снабженной персональными компьютерами, программным обеспечением для выполнения обработки экспериментальных данных.

Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к лабораторным и практическим занятиям;
- работу с интернет-источниками;
- посещение научных семинаров и конференций, проводимых в Санкт-Петербурге;
- подготовку к сдаче зачётов и экзаменов.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, пройденный на семинарских занятиях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в «Рабочей программе». По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в «Рабочей программе» дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Все виды занятий по дисциплине преподаватели должны проводить в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 016-2015 КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

СТП СПб ГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Практические и семинарские занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПб ГТИ 040-2002. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования. Утв. Ректором 17.05.2002;

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению. Утв. Ректором 11.12.2009;

Планирование времени, необходимого для изучения 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 студентов должен приходить, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

С целью более эффективного усвоения студентами материала данной дисциплины рекомендуется при проведении занятий использовать мультимедийные ресурсы, а также ресурсы сети интернет.

Устный опрос проводится с целью определения качества усвоения лекционного материала.

На контрольных мероприятиях студентам предлагается ответить на 3 вопроса по материалам учебной дисциплины. Оценка проставляется в зачетную книжку.

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
- информационные справочные системы Scirus.com. SciFinder, Reaxys

Для расширения знаний по теме обучения рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как, www.yandex.ru, www.google.ru и других, и использовать материалы Интернет-ресурсов профильных организаций, рекомендованных преподавателем.

Возможна сдача электронного варианта отчетов, рефератов, литературных обзоров и др. по электронной почте, обмен информацией по социальным сетям.

10.2. Программное обеспечение.

Пакеты прикладных программ стандартного набора (MicrosoftOffice). (Microsoft Excel; Microsoft Word; Microsoft PowerPoint).

Проводить поиск в системах: Scirus.com. SciFinder, Reaxys.

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

- Электронно-библиотечные системы, предлагаемые библиотекой СПбГТИ(ТУ).
- Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»,
- «Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
- Федеральный портал «Российское образование» <http://www.edu.ru/>
- Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» <http://school-collection.edu.ru/>
- «Лань» <https://e.lanbook.com/books/>. ООО «Издательство «Лань».
- «Научно-электронная библиотека eLibrary.ru». <http://elibrary.ru>. Наименование организации – ООО РУНЭБ.

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

- Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники на 50 посадочных мест.

- Для проведения лабораторных занятий используется синтетический практикум, рассчитанный на 30 рабочих мест, оборудованный для проведения химических синтезов.

Кафедра оснащена необходимым научно-исследовательским оборудованием, измерительными и вычислительными комплексами и другим материально-техническим обеспечением, необходимым для полноценного прохождения учебного процесса.

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

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные 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 г.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Теоретические методы расчёта структуры и свойств органических
соединений азота»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-7	Способен прогнозировать взрывчатые свойства индивидуальных и смесевых энергонасыщенных веществ, исследовать структуру и свойства органических соединений азота с использованием современного оборудования и теоретических методов расчёта	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-7.6 Способность проводить расчёты структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами.	Называет Основные теоретические методы расчётов в химии (3.7.6.1);	Правильные ответы на вопросы № 1,2 к зачёту	Называет основные теоретические методы расчётов в химии путанно и с ошибками	Называет основные теоретические методы расчётов в химии с подсказками преподавателя	Быстро и чётко называет основные теоретические методы расчётов в химии
	Сопоставляет и делает выводы По теоретическим расчётам структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами (У.7.6.1);	Правильные ответы на вопросы №3-5, 8-14 к зачёту	С ошибками сопоставляет и делает выводы по теоретическим расчётам структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами	С помощью наводящих вопросов преподавателя сопоставляет и делает выводы по теоретическим расчётам структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами	Сопоставляет и делает выводы по теоретическим расчётам структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами правильно, в условиях дефицита времени
	Выполняет алгоритм Методов расчёта структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами. (В.7.6.1)	Правильные ответы на вопросы №6,7,15,16 к зачёту	Неточно выполняет алгоритм методов расчёта структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами.	Определяет закономерности методов расчёта структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами.	Определяет закономерности расчёта структуры и свойств органических соединений азота эмпирическими, механическими и квантово-химическими методами. и может применить их

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации
Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента
по компетенции ПК-7:

1. Общая классификация методов расчёта.
2. Задачи и применимость расчётных методов.
3. Нахождение энергетического минимума системы.
4. Нахождение энергетического максимума (переходного состояния).
5. Прогноз свойств системы. Время расчёта и размер молекулы.
6. Эмпирические методы (корреляционные методы, QSAR и проч.);
7. Молекулярная механика и молекулярная динамика (корпускулярные представления об атомах и молекулах).
8. Кривая потенциальной энергии растяжения химической связи.
9. Энергия реальной молекулы. Свойства поверхности потенциальной энергии. Составляющие потенциальной энергии.
10. Наборы силовых полей и программные продукты.
11. Квантовая химия (решение уравнений квантовой механики с приближениями – нахождение волновой функции).
12. Квантование энергии.
13. Корпускулярно-волновой дуализм.
14. Соотношение неопределенностей. Волновая функция. Уравнение Шредингера.
15. Метод молекулярных орбиталей.
16. Методы квантовой химии.

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

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

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачёта.

Шкала оценивания на зачёте – «зачёт», «незачёт». При этом «зачёт» соотносится с пороговым уровнем сформированности компетенции.