

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

*Факультет физико-математических и естественных наук*

Рекомендовано МССН  
по направлению 04.00.00 «Химия»

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Наименование дисциплины**

**ПРИМЕНЕНИЕ ПО В НЕОРГАНИЧЕСКОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ**

**Рекомендуется для направления подготовки/специальности**

**04.04.01 "ХИМИЯ"**

**Направленность программы (профиль)**

**«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»**

**1. Цели и задачи дисциплины:** развить у студентов навыки владения современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.

**2. Место дисциплины в структуре ОП ВО:** Дисциплина «Применение программного обеспечения (ПО) в неорганическом эксперименте» относится к части «Дисциплины по выбору студента» блока 1 (Модуль 1 «Неорганическая химия») учебного плана по направлению 04.04.01. Для успешного освоения дисциплины учащийся магистратуры обязан иметь базовые знания на уровне бакалавра.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

**Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций**

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
<b>Универсальные компетенции</b>			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования Рентгendifракционные методы в неорганической химии Физические методы исследования веществ и материалов Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе НИР	Актуальные задачи современной химии Химия твердого тела Бионеорганическая химия Экспериментальные методы исследования в химии НИР Преддипломная практика
УК-7	Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	Актуальные задачи современной химии	НИР Преддипломная практика
<b>Профессиональные компетенции</b>			
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-	Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных	Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР

исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования Рентгendifракционные методы в неорганической химии Физические методы исследования веществ и материалов Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе НИР	Преддипломная практика
М-ПК-2-н Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Спектральные методы в неорганической химии Химия координационных соединений Резонансные методы в химии Электрохимические методы исследования Рентгendifракционные методы в неорганической химии Физические методы исследования веществ и материалов Физико-химический анализ Методика преподавания химии в вузе НИР	Химия твердого тела Бионеорганическая химия НИР Преддипломная практика

### 3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

#### Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
УК-7	Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для	УК-7.1. Использует цифровые технологии и методы поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии. УК-7.2. Разрабатывает концепцию цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в рамках обозначенной проблемы: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения в условиях цифровой экономики и современной корпоративной информационной культуры;

	решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	УК-7.3. Осуществляет мониторинг использования цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии, корректирует отклонения, вносит дополнительные изменения в план использования цифровых технологий.
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

В результате изучения дисциплины студент должен:

**Знать:** современные компьютерные технологии и подходы, используемые при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, а также при сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.

**Уметь:** применять современные компьютерные технологии для планирования исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, а также при сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации.

**Владеть:** современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований.

#### 4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет **2** зачетных единиц.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		5			
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>	<b>36</b>	<b>36</b>			
В том числе:					
<i>Лекции</i>	<b>18</b>	18			
<i>Практические занятия (ПЗ)</i>					
<i>Семинары (С)</i>					
<i>Лабораторные работы (ЛР)</i>	<b>18</b>	18			
<b>Самостоятельная работа (всего)</b>	<b>72</b>	72			
Общая трудоемкость	час	<b>108</b>	108		
	зач. ед.	<b>3</b>	3		

## 5. Содержание дисциплины

### 5.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1.	Введение	Многообразие современных методов физико-химического анализа и программного обеспечения (ПО), используемого для обработки и интерпретации полученных данных в неорганической химии. Стандартное ПО, поставляемое с приборами. Существующие программные комплексы для анализа экспериментальных результатов и расчёта физико-химических характеристик. Базы данных (БД).
2.	Физико-химические методы анализа и современные способы регистрации экспериментальных данных	Способы регистрации сигнала в приборах. Чувствительность методов регистрации. Обработка сигнала и его аппаратный пересчёт в исследуемые физические величины для дифракционных, термических, электрофизических, спектроскопических и микроскопических методов анализа с применением стандартного ПО. Калибровка приборов и возможности современного ПО.
3.	Методы обработки экспериментальных данных	Статистический анализ экспериментальных зависимостей физических величин с использованием стандартного ПО, современных программных комплексов и БД. Моделирование и аппроксимация экспериментальных результатов. Оценка достоверности полученных данных с использованием различных моделей и приближений. ПО и методы обработки изображений с микроскопа: анализ цифровой фотографии.
4.	Графическое представление результатов экспериментов	Общие требования к представлению графических зависимостей. ПО для построения 2D и 3D графических изображений при представлении и интерпретации результатов. Использование цветовой шкалы для представления и интерпретации результатов.

### 5.3. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	Семина	СРС	Всего час.
1.	Введение	2				6	8
2.	Физико-химические методы анализа и современные способы регистрации экспериментальных данных	4		6		26	36
3	Методы обработки	6		6		20	32

	экспериментальных данных						
4	Графическое представление результатов экспериментов	6		6		20	32
	Всего	18		18		72	108

**6. Лабораторный практикум не предусмотрены программой.**

### 7. Практические занятия (семинары)

№ п/п	№ раздела дисциплины	Тема практического занятия (семинара)	Трудоёмкость (час.)
1.	2	Методы регистрации сигнала и его представление для дифракционных, спектральных и термических методов анализа	6
2.	3	Анализ данных титриметрии, дифференциально-термического и рентгенофазового анализов	6
3.	4	Графическое представление экспериментальных данных термических, спектральных и дифракционных методов исследования	6
	Всего		18

### 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

1. Термоанализатор «SDT Q600» со стандартным программным обеспечением
2. Дифрактометр рентгеновский «ДРОН-7» со стандартным программным обеспечением
3. ИК-фурье спектрометр «Nicolet» 6700 со стандартным программным обеспечением
4. ПО со свободной лицензией «Рентгеноструктурный табличный процессор (RTP)» v.4.0 (<http://slavic.me/rtp/index.htm> )
5. Персональные компьютеры
6. Принтер

### 9. Информационное обеспечение дисциплины

а) программное обеспечение

программный пакет Microsoft Office (Word, Excel, Power Point, Paint).

б) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы (открытый доступ):

- Интерактивный дополнительный сетевой справочный курс для самостоятельной работы по теме "Фазовые диаграммы" (<http://www.soton.ac.uk/~pasr1/index.htm> )
- Сетевая база данных и пособие по анализу химической термодинамики **F\*A\*C\*T** ([http://www.crct.polymtl.ca/factsage/index\\_m.php](http://www.crct.polymtl.ca/factsage/index_m.php) )  
(<http://www.crct.polymtl.ca/fact/download.php> )
- Сетевая база спектральных данных (открытый доступ): «Spectral Database for Organic Compounds» (SDBS) ([https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre\\_index.cgi](https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi) )
- Сетевая база природных минералов (открытый доступ) «Mineralogy Database» (<http://webmineral.com> )
- Сетевые библиотеки:
  1. Большая Научная Библиотека (<http://sci-lib.com/> )
  2. Каталог химических ресурсов на CHEMPORT.RU ([http://www.chemport.ru/catalog\\_tree.php](http://www.chemport.ru/catalog_tree.php))
  3. Сайт о химии (<http://www.xumuk.ru/> )

4. Список библиотек (доступ с ПК РУДН) (<http://www.rad.pfu.edu.ru/licenzirovannye-resursy/tehnicheskie-i-estestvennye-nauki> )
5. Электронная библиотека РФФИ (<http://www.rad.pfu.edu.ru/licenzirovannye-resursy/tehnicheskie-i-estestvennye-nauki> )

Методические материалы на сайте ТУИС (рабочая программы курса, лекционные материалы, методическое обеспечение лабораторных занятий, материалы для подготовки к аттестационным испытаниям).

## 10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

### а) основная литература

1. Кларк Т. Компьютерная химия. Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекул. Пер. с англ. А.А.Коркина; Под ред. В.С.Мастрюкова, Ю.Н.Панченко. // М.: Мир, 1990. 383 с.
2. Грановский В.А., Сирая Т.Н. Методы обработки экспериментальных данных при измерениях. // Л.: Энергоатомиздат. 1990. - 288 с.
3. Лбов Г.С. Методы обработки разнотипных экспериментальных данных. Отв. ред. Л.А.Растрин. // Новосибирск: Наука, 1981. 160 с.

### б) дополнительная литература

1. ЭВМ помогает химии. Под ред. Г. Вернена, М. Шанона; Пер. с англ. под ред. И. Я. Берштейна, Н. Н. Храмова. // Л.: Химия, 1990. - 383 с.
2. Баркер Ф.Д. Компьютеры в аналитической химии. Пер. с англ. О.А.Басченко, И.А.Тополя. // М.: Мир. 1987. 519 с.
3. Саутин С.Н., Пунин А.Е. Мир компьютеров и химическая технология // М. : Химия. 1991. 144 с.
4. Евсеев А.М., Николаева Л.С. Математическое моделирование химических равновесий. // М.: Изд-во МГУ, 1988. 191 с.

## 11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

При изучении дисциплины «Применение ПО в неорганическом эксперименте» предполагается посещение студентами лекций, выполнение заданий на практических занятиях. В конце семестра проводится промежуточный контроль также в форме выполнения контрольного практического задания.

Самостоятельная работа студентов включает в себя подготовку к этим видам работ и контроля.

### *Подготовка и выполнение заданий на практических занятиях*

При выполнении практических заданий необходимо предварительно изучить соответствующие теоретические разделы лекционного курса «Применение ПО в неорганическом эксперименте».

Выполнить домашнее задание для подготовки к выполнению задания по теме на практическом занятии.

После получения конкретного задания следует провести необходимые работы для его выполнения, ответить на вопросы преподавателя по ходу выполнения задания.

При оценке выполнения практического задания учитывается качество выполнения работы, уровень компетентности студента в решении поставленных задач, рациональность и обоснованность действий.

### *Подготовка к прохождению промежуточной аттестации (экзамена).*

При подготовке к прохождению промежуточной аттестации, студенты могут пользоваться лекционным материалом, основной и дополнительной литературой, а также рекомендуемыми информационными источниками и результатами выполнения практических заданий.

Оценка экзаменационного ответа подразумевает полноту ознакомления студента с теоретическим материалом по заданному вопросу и владение практическими навыками при выполнении задания.

## **12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)**

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Применение ПО в неорганическом эксперименте» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

### **Разработчики:**

Доцент кафедры неорганической химии

Фортальнова Е.А.

### **Руководитель программы**

профессор,  
кафедры органической химии

Варламов А. В.

**Заведующий кафедрой  
неорганической химии**

Хрусталеv В.Н.