

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

**Новомосковский институт (филиал)
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ФТД.01. Компьютерные методы установления строения органических соединений

**направление подготовки (специальность):
18.03.01 Химическая технология**

профиль: Химическая технология органических веществ

Квалификация: бакалавр

Форма обучения - очная

Новомосковск - 2022

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Нормативные документы, используемые при разработке основной образовательной программы

Нормативную правовую базу разработки рабочей программы дисциплины составляют:

Федеральный закон от 29 декабря 2012 года № 273-ФЗ «Об образовании в Российской Федерации» (с учетом дополнений и изменений);

Федеральный закон от 31.07.2020 г №304-ФЗ «О внесении изменений в Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации» по вопросам воспитания обучающихся»;

«Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования — программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры», утвержденный приказом Министерства образования и науки РФ от 05.04.2017 г N 301;

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС ВО) (ФГОС-3++) по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 07.08.2020 г. № 922 (Зарегистрировано в Минюсте России 19.08.2020 г. № 59336);

Положение о практической подготовке обучающихся, утвержденное приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и Министерства просвещения Российской Федерации от 5 августа 2020 г. N 885/390 (зарегистрирован Министерством юстиции Российской Федерации 11 сентября 2020 г., регистрационный N 59778);

Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн)

Устав ФГБОУ ВО РХТУ им. Д.И. Менделеева;

Положение о Новомосковском институте (филиале) РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Локальные нормативные акты Новомосковского института (филиала) РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Положение о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в НИ РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета НИ РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019;

Положения об электронной информационно-образовательной среде Новомосковского института (филиала) федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Основная профессиональная образовательная программа (далее – Программа, ОПОП) составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (уровень бакалавриата) по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 07.08.2020 г. № 922 (Зарегистрировано в Минюсте России 19.08.2020 г. № 59336) (ФГОС ВО), рекомендациями Учебно-методической комиссии НИ РХТУ им. Д.И. Менделеева и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой ХТО-ВиПМ НИ РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в Институте системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий полностью или частично.

2. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная цель дисциплины состоит в ознакомлении студентов с традиционными и компьютерными методами решения одной из наиболее сложных задач химической практики - установления строения неизвестных органических соединений с помощью современных методов молекулярной спектроскопии (масс-спектрометрия, спектроскопия ядерного магнитного резонанса, инфракрасная спектроскопия).

Задачи преподавания дисциплины:

– приобретение навыков анализа различных видов спектров (МС, ИК, ЯМР) с целью получения информации о строении изучаемых соединений (молекулярная масса, элементный состав, структурные особенности)

– приобретение навыков решения задачи установления строения неизвестных органических соединений по набору спектров (МС, ИК, ЯМР) традиционными методами

– приобретение навыков решения задачи установление строения неизвестных органических соединений по набору спектров (МС, ИК, ЯМР) с помощью современных компьютерных средств и методов.

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП:

Дисциплина входит в раздел факультативных дисциплин модуля «Химическая технология органических веществ», блок **ФТД.В.01.** (6 семестр, 3 курс). Для ее освоения необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин: органическая химия, прикладная информатика, физические методы исследования органических соединений, компьютерные методы идентификации органических соединений.

4. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на формирование профессиональных компетенций ПК-4, ПК-5 и индикаторов достижения профессиональной компетенции ПК-4.2, ПК-5.4.

Профессиональные компетенции

ПК-4: готов применять цифровые информационные технологии для решения технологических задач в профессиональной области.

ПК-5: способен осуществлять проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований, выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок, готовность осуществлять подготовку документации, проектов планов и программ проведения отдельных этапов работ

Индикаторы профессиональных компетенций

ПК-4.2: Использует сетевые компьютерные технологии для получения информации в сфере своей профессиональной деятельности

ПК-5.4: Готов использовать знания основных физических теорий для решения возникающих физических задач, самостоятельного приобретения физических знаний, для понимания принципов работы приборов и устройств, в том числе выходящих за пределы компетентности конкретного направления

В результате изучения дисциплины в рамках компетенций ПК-4 и ПК-5 студент должен :

Знать:

- теоретические основы и возможности современных спектральных методов (МС, ИК и ЯМР) при решении задачи установления строения органических соединений
- традиционные и компьютерные «технологии» решения данной задачи с помощью этих методов
- современное состояние дел в области информационного и программного обеспечения решения данной задачи и сопутствующих ее проблем.
- компьютерные технологии обработки результатов спектрального анализа

Уметь:

- осуществить выбор необходимых спектральных методов для решения конкретной структурной задачи, анализировать полученные спектры и принимать обоснованные решения о строении изучаемого соединения с использованием литературных данных и программных средств, доступных в НИ РХТУ и через Интернет

Владеть:

- современными компьютерными методами решения задачи установления строения неизвестных органических соединений по спектральным данным (МС, ЯМР, ИК).

5. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА

Общая трудоемкость дисциплины составляет **72** час или **2** зачетные единицы (з.е). 1 з.е. равна 27 астрономическим часам или 36 академическим часам или 27 астрономическим часам.

Вид учебной работы	Объем		в том числе в форме практической подготовки
	з.е.	акад. ч.	акад. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	2	72	12

Контактная работа - аудиторные		32,35	
Лекции		16	
Практические занятия (ПЗ)		16	12
Самостоятельная работа		39,65	
Форма (ы) контроля: зачет, экзамен			
Зачет		0,35	

6. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Разделы (модули) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции час.	Практ. зан. час.	СРС час.	Всего час.
1	Предмет и задачи дисциплины	1			1
2	Масс-спектрометрия.	2	2	5	9
3	ЯМР- спектроскопия.	2	2	5	9
4	ИК-спектроскопия	1	1	5	7
5	ЛБД-МС	2	2	5	9
6	КМУСОС	3	4	5	12
7,8	ИПС-МС и ИЛС-МС	3	3	10	16
9	Экспертные системы	2	2	5	9
	Итого	16	16	40	72

6.2. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела
1	Предмет и задачи дисциплины	Установление строения органических соединений – одна из наиболее сложных задач в химической практике. Современные спектральные методы исследования и установления строения органических соединений. Состояние и перспективы развития компьютерных методов решения структурных задач по спектральным данным. Информационные ресурсы и программные средства, поддерживающие решение этих задач.
2	Метод масс-спектрометрии (МС)	Общая характеристика, теоретические основы и возможности метода при установлении строения неизвестных органических соединений (определение молекулярной массы, элементного состава и структурных особенностей анализируемого соединения). Ручные методы решения структурных задач по масс-спектрам низкого разрешения.
3	Метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР)	Общая характеристика, теоретические основы и возможности метода при установлении строения неизвестных органических соединений. Определение структурных особенностей на основе спектральных характеристик ЯМР - химический сдвиг, интенсивность и мультиплетность сигналов. Особенности спектроскопии ЯМР на ядрах ^1H и ^{13}C . Ручные методы решения структурных задач по ЯМР-спектрам.
4	Метод инфракрасной спектроскопии (ИК)	Общая характеристика, теоретические основы и возможности метода при установлении строения неизвестных органических соединений. Определение функциональных групп и структурных фрагментов по характеристическим частотам поглощения с помощью таблиц структурных корреляций). Ручные методы решения структурных задач по ИК-спектрам
5	Литературные коллекции и компьютерные банки данных по молекулярной спектроскопии (ЛБД-МС)	Обзор наиболее известных коллекций и баз данных по масс-спектрометрии, ИК спектроскопии и спектроскопии ЯМР. Содержание баз данных, методы создания и доступа к ним. Вопросы оценки качества баз данных. Международные форматы представления и обмена спектральными и структурными данными (JCAMП-DX). Способы кодиро-

		вания структурной информации (поатомный, мелко- и крупноблочный) и представление ее в БД (линейная запись, матрица смежности). Канонизация кодов структурных формул.
6	Компьютерные средства и методы решения задач установления строения органических соединений по данным молекулярной спектроскопии (КМУ-СОС	Искусственный интеллект, библиотечный поиск, распознавание образов, искусственные нейронные сети. Теоретические основы методов и возможности их использования для решения задач установления строения органических. Особенности решения этих задач с использованием различных видов спектров (масс-, ИК, ЯМР) и некоторых их комбинаций.
7	Информационно-поисковые системы по молекулярной спектроскопии (ИПС-МС)	Назначение, организация и основные элементы. Алгоритмы "прямого" и обратного" поисков, методы оценки спектрального подобия и достоверности результатов идентификации. Обзор наиболее известных ИПС по различным видам спектров (PBM, SEARCH/NMR, OMNIC, ZaiR, ПОИСК-МС). Краткая характеристика, примеры решения задач и сравнительная оценка. Перспективы развития ИПС.
8	Информационно-логические системы (ИЛС-МС)	Назначение, организация и основные элементы. Программные средства манипулирования структурной информацией ("пересечение" и "разборка", сравнение и генерирование, поиск структурных аналогов) - важная компонента ИЛС. Системы Компас-МС, ХимАрт и SpecInfo (краткая характеристика, примеры решения задач, сравнительная оценка, перспективы развития).
9	Экспертные системы	Назначение, организация и основные элементы. Базы знаний. Структурно-групповой анализ. Использование 2D NMR спектров. Наиболее известные экспертные системы (DENDRAL, CHEMICS, ACD/Structure Elucidator, PACTP). Краткая характеристика, примеры решения задач, сравнительная оценка, перспективы развития.

6.3 Темы практических занятий и формы текущего контроля

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование практических занятий	Трудоемкость (час)	Форма контроля	Код формируемых компетенций
1	2	Аналитические возможности метода масс-спектрометрии при решении задачи установления строения органических соединений.	4	КР, УО	ПК-2
2	3	Аналитические возможности метода ЯМР-спектроскопии при решении задачи установления строения органических соединений.	4	КР, УО	ПК-2
3	4	Аналитические возможности метода ИК-спектроскопии при решении задачи установления строения органических соединений.	2	КР, УО	ПК-2
4	5,6,7,8	Знакомство и приобретение навыков работы с имеющимися в НИ РХТУ компьютерными системами установления строения органических соединений по спектральным данным (МС, ИК, ЯМР) .	6	УО	ПК-2

КР – контрольная работа
УО- устный опрос

Перечень вопросов (заданий) к контрольным работам текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Компьютерные методы установления строения органических соединений» приведен в документе «**Фонд оценочных средств**» дисциплины .

6.4. Тематика индивидуальных заданий

Установить строение неизвестного органическое соединение по набору различных видов спектров (масс-, ИК-, 1Н- и 13С-ЯМР)

Перечень индивидуальных заданий для промежуточной аттестации приведен в документе «**Фонд оценочных средств**» дисциплины «Компьютерные методы установления строения органических соединений»

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Внеаудиторная СРС направлена на подготовку и выполнение контрольных работ, выполнение индивидуального задания и подготовку к зачетному занятию.

Самостоятельная работа проводится с целью освоения знаний и умений по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах, конференциях, проводимых в Институте по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче зачета, экзамена, лабораторному практикуму по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам надо осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Оценочные материалы представлены в виде отдельного документа – «**Фонд оценочных средств**», являющегося неотъемлемой частью рабочей программы дисциплины «Компьютерные методы идентификации органических соединений».

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Организация образовательного процесса регламентируется учебным планом и расписанием учебных занятий. Язык обучения (преподавания) — русский. Для всех видов аудиторных занятий «час» устанавливается продолжительностью 45 минут. Зачетная единица составляет 27 астрономических часов или 36 академических час. Через каждые 45 мин контактной работы делается перерыв продолжительностью 5 мин, а после двух час. контактной работы делается перерыв продолжительностью 10 мин.

Сетевая форма реализации программы дисциплины не используется.

Обучающийся имеет право на зачет результатов обучения по дисциплине, если она освоена им при получении среднего профессионального образования и (или) высшего образования, а также дополнительного образования (при наличии) (далее - зачет результатов обучения). Зачтенные результаты обучения учитываются в качестве результатов промежуточной аттестации. Зачет результатов обучения осуществляется в порядке и формах, установленных локальным актом НИ РХТУ – Порядок и формы зачета результатов обучения по отдельным дисциплинам (модулям) и практикам, освоенным обучающимся, при реализации образовательных программ высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета в Новомосковском институте (филиале) **федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования** «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

9.1. Образовательные технологии

Учебный процесс при преподавании дисциплины основывается на использовании традиционных, инновационных и информационных образовательных технологий. Традиционные образовательные техноло-

гии представлены лекциями и семинарскими (практическими) занятиями. Инновационные образовательные технологии используются в виде применения активных и интерактивных форм проведения занятий. Информационные образовательные технологии реализуются путем активизации самостоятельной работы студентов в информационной образовательной среде. При проведении учебных занятий обеспечивается развитие у обучающихся навыков командной работы, межличностной коммуникации, принятия решений, лидерских качеств (включая проведение интерактивных лекций, групповых дискуссий, ролевых игр, тренингов, анализ ситуаций и имитационных моделей, преподавание дисциплин (модулей) в форме курсов, составленных на основе результатов научных исследований, проводимых организацией, в том числе с учетом региональных особенностей профессиональной деятельности выпускников и потребностей работодателей).

9.2. Лекции

Лекционный курс предполагает систематизированное изложение основных вопросов содержания дисциплины.

На первой лекции лектор обязан предупредить студентов, применительно к какому базовому учебнику (учебникам, учебным пособиям) будет прочитан курс.

Лекционный курс обеспечивает более глубокое понимание учебных вопросов при значительно меньшей затрате времени, чем это требуется среднестатистическому студенту на самостоятельное изучение материала.

9.3. Занятия семинарского типа

Семинарские (практические) занятия представляют собой детализацию лекционного теоретического материала, направлены на отработку навыков, проводятся в целях закрепления курса и охватывают все основные разделы дисциплины.

Основной формой проведения семинаров и практических занятий является обсуждение наиболее проблемных и сложных вопросов по отдельным темам, а также решение задач и разбор примеров и ситуаций при контактной работе. В обязанности преподавателя входят: оказание методической помощи и консультирование студентов по соответствующим темам курса, ответы на вопросы, управление процессом решения задач.

Активность на практических занятиях оценивается по следующим критериям:

- ответы на вопросы, предлагаемые преподавателем;
- участие в дискуссиях;
- выполнение заданий (решение задач);

Доклады и оппонирование докладов проверяют степень владения теоретическим материалом, а также корректность и строгость рассуждений.

Оценивание практических заданий входит в оценку.

9.4. Самостоятельная работа студента

Для успешного усвоения дисциплины необходимо не только посещать аудиторные занятия, но и вести активную самостоятельную работу. При самостоятельной проработке курса обучающиеся должны:

- повторить законспектированный на лекционном занятии материал и дополнить его с учетом рекомендованной по данной теме литературы;
- изучить рекомендованную основную и дополнительную литературу, составлять тезисы, аннотации и конспекты наиболее важных моментов;
- самостоятельно выполнить индивидуальные задания (раздел 5.8);
- использовать для самопроверки материала оценочные средства.

Индивидуальное задание (реферат) оценивается по следующим критериям:

- правильность выполнения задания;
- аккуратность в оформлении работы;
- использование специальной литературы;
- своевременная сдача выполненного задания (указывается преподавателем).

Задания, сданные студентом после окончания зачетной недели текущего семестра, в котором они должны быть выполнены, не оцениваются.

9.5. Методические рекомендации для преподавателей

Основные принципы обучения

1. Цель обучения – развить мышление, выработать мировоззрение; познакомить с идеями и методами науки; научить применять принципы и законы для решения простых и нестандартных задач.

2. Обучение должно органически сочетаться с воспитанием. Нужно развивать в студентах волевые качества и трудолюбие. Ненавязчиво, к месту прививать элементы культуры поведения. В частности, препода-

даватель должен личным примером воспитывать в студентах пунктуальность и уважение к чужому времени. Недопустимо преподавание односеместровой учебной дисциплины превращать в годичное.

3. Обучение должно быть не пассивным (сообщим студентам некоторый объем информации, расскажем, как решаются те или иные задачи), а активным. Нужно строить обучение так, чтобы в овладении материалом основную роль играла память логическая, а не формальная. Запоминание должно достигаться через глубокое понимание.

4. Одно из важнейших условий успешного обучения – умение организовать работу студентов.

5. Отношение преподавателя к студентам должно носить характер доброжелательной требовательности. Для стимулирования работы студентов нужно использовать поощрение, одобрение, похвалу, но не порицание (порицание может применяться лишь как исключение). Преподаватель должен быть для студентов доступным.

6. Необходим регулярный контроль работы студентов. Правильно поставленный, он помогает им организовать систематические занятия, а преподавателю достичь высоких результатов в обучении.

7. Важнейшей задачей преподавателей, ведущих занятия по дисциплине, является выработка у студентов осознания необходимости и полезности знания дисциплины как теоретической и практической основы для изучения профильных дисциплин.

8. С целью более эффективного усвоения студентами материала данной дисциплины рекомендуется при проведении лекционных, практических и лабораторных занятий использовать современные технические средства обучения, а именно презентации лекций, наглядные пособия в виде схем приборов, деталей и конструкций приборов, компьютерное тестирование.

9. Для более глубокого изучения предмета и подготовки ряда вопросов (тем) для самостоятельного изучения по разделам дисциплины преподаватель предоставляет студентам необходимую информацию о использовании учебно-методического обеспечения: учебниках, учебных пособиях, сборниках примеров и задач и описание лабораторных работ, наличии Интернет-ресурсов.

При текущем контроле рекомендуется использовать компьютерное или бланковое тестирование, контрольные коллоквиумы или контрольные работы.

Контрольное (итоговое) тестирование включает в себя задания по всем темам раздела рабочей программы дисциплины.

10. Цель лекции – формирование у студентов ориентировочной основы для последующего усвоения материала методом самостоятельной работы. Содержание лекции должно отвечать следующим дидактическим требованиям:

- изложение материала от простого к сложному, от известного к неизвестному;
- логичность, четкость и ясность в изложении материала;
- возможность проблемного изложения, дискуссии, диалога с целью активизации деятельности студентов;
- опора смысловой части лекции на подлинные факты, события, явления, статистические данные;
- тесная связь теоретических положений и выводов с практикой и будущей профессиональной деятельностью студентов.

Преподаватель, читающий лекционные курсы, должен знать существующие в педагогической практике варианты лекций, их дидактические и воспитывающие возможности, а также их место в структуре процесса обучения.

11. При проведении аттестации студентов важно всегда помнить, что систематичность, объективность, аргументированность – главные принципы, на которых основаны контроль и оценка знаний студентов. Знание критериев оценки знаний обязательно для преподавателя и студента.

9.6. Методические указания для студентов

По подготовке к лекционным занятиям

Изучение дисциплины требует систематического и последовательного накопления теоретических знаний, следовательно, пропуски отдельных тем не позволяют глубоко освоить предмет. Студентам необходимо:

1. перед каждой лекцией просматривать рабочую программу дисциплины;
2. перед следующей лекцией необходимо просмотреть по конспекту материал предыдущей.

При затруднениях в восприятии материала следует обратиться к основным литературным источникам. Если разобраться в материале не удалось, необходимо обратиться к лектору или к преподавателю на практических занятиях. Не оставляйте «белых пятен» в освоении материала!

По самостоятельному выполнению индивидуальных заданий

Усвоение материала дисциплины во многом зависит от осмысленного выполнения домашнего задания. При решении задач целесообразно руководствоваться следующими правилами.

1. Прежде всего, нужно хорошо вникнуть в условие задачи, записать кратко ее условие.
2. Если позволяет характер задачи, обязательно сделайте рисунок, поясняющий ее сущность.
3. За редкими исключениями, каждая задача должна быть сначала решена в общем виде (т. е. в буквенных обозначениях, а не в числах), причем искомая величина должна быть выражена через заданные величины.
4. Получив решение в общем виде, нужно проверить, правильную ли оно имеет размерность.
5. Если это возможно, исследовать поведение решения в предельных случаях.
6. В тех случаях, когда в процессе нахождения искомого величин приходится решать систему нескольких громоздких уравнений (как, например, расчет равновесного выхода продукта), целесообразно сначала подставить в эти уравнения числовые значения коэффициентов и лишь затем определять значения искомого величин.
7. При подстановке в уравнение числовых значений обозначенных величин, обратите внимание на то, чтобы все эти значения были в одной и той же системе единиц. Чтобы облегчить определение порядка вычисляемой величины, полезно представить исходные величины в виде чисел, близких к единице, умноженных на 10 в соответствующей степени (например, вместо 24700 подставить $2,47 \cdot 10^4$, вместо 0,00086 — число $0,86 \cdot 10^{-3}$ и т. д.).
8. Получив числовой ответ, нужно оценить его правдоподобность. Такая оценка может в ряде случаев обнаружить ошибочность полученного результата.

Решение задач принесет наибольшую пользу только в том случае, если обучающийся решает задачи самостоятельно. Решить задачу без помощи, без подсказки часто бывает нелегко и не всегда удается. Но даже не увенчавшиеся успехом попытки найти решение, если они предпринимались достаточно настойчиво, приносят ощутимую пользу, так как развивают мышление и укрепляют волю. Решение задач ни в коем случае не следует откладывать на последний вечер перед занятиями, как, к сожалению, нередко поступают студенты. В этом случае более сложные и притом наиболее содержательные и полезные задачи заведомо не могут быть решены. В рекомендуемых учебниках и сборниках задач, в разделе, в котором помещены задачи для решения, имеются примеры (рассмотренные задачи). Поэтому толчком к решению данной задачи может послужить ознакомление с несколькими решенными задачами.

Среди обучающихся часто встречается заблуждение - они считают, что ошибка в порядке величины (даже на несколько порядков) менее существенна, чем ошибка в значащих цифрах. Необоснованность такого мнения легко обнаруживается на следующем примере. Ошибка, заключающаяся в том, что вместо 5 получено 8, составляет 60 %, в то время как ошибка всего на один порядок (например, вместо 10^4 получено 10^5) составляет 900 %.

9.7. Методические рекомендации по обучению лиц с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов

Профессорско-преподавательский состав знакомится с психолого-физиологическими особенностями обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, индивидуальными программами реабилитации инвалидов (при наличии). При необходимости осуществляется дополнительная поддержка преподавания психологами, социальными работниками, прошедшими подготовку ассистентами.

Предполагается использовать социально-активные и рефлексивные методы обучения, технологии социокультурной реабилитации с целью оказания помощи в установлении полноценных межличностных отношений с другими студентами, создании комфортного психологического климата в студенческой группе. Подбор и разработка учебных материалов производится с учетом предоставления материала в различных формах: аудиальной, визуальной, с использованием специальных технических средств и информационных систем.

Освоение дисциплины лицами с ОВЗ осуществляется с использованием средств обучения общего и специального назначения (персонального и коллективного использования).

Для студентов с ОВЗ предусматривается доступная форма предоставления заданий оценочных средств, а именно:

- в печатной или электронной форме (для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата);
- в печатной форме или электронной форме с увеличенным шрифтом и контрастностью (для лиц с нарушениями слуха, речи, зрения);
- методом чтения ассистентом задания вслух (для лиц с нарушениями зрения).

Лабораторные работы выполняются методом вычислительного эксперимента.

Студентам с инвалидностью увеличивается время на подготовку ответов на контрольные вопросы.

Для таких студентов предусматривается доступная форма предоставления ответов на задания, а именно:

- письменно на бумаге или набором ответов на компьютере (для лиц с нарушениями слуха, речи);
- выбором ответа из возможных вариантов при тестировании с использованием услуг ассистента (для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата);
- устно (для лиц с нарушениями зрения, опорно-двигательного аппарата).

При необходимости для обучающихся с инвалидностью процедура оценивания результатов обучения может проводиться в несколько этапов.

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Информационную поддержку освоения дисциплины осуществляет библиотека Института, которая обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда на 01.03.2021 г составляет более 405 000 экз.

Библиотека располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. Библиотека обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Института и Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

10.1. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература	Режим доступа	Обеспеченность
О-1.Вершинин В.И., Дерендяев Б.Г., Лебедев К.С. Компьютерная идентификация органических соединений. М.: ИКЦ Академкнига, 2002- 197 с.	Библиотека НИ РХТУ	Да
Дополнительная литература	Режим доступа	
Д1. Иоффе Б.В. Физические методы определения строения органических соединений [Текст] : учеб. пособ. для вузов . - М. : Высш. шк. , 1984. - 336 с. Д.2. Миронов В.А., Янковский С.А. Спектроскопия в органической химии. Сборник задач : Учебное пособие для вузов. – М: Химия, 1985.- 232 с.	Библиотека НИ РХТУ	Да

10.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

При реализации образовательного процесса используются следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

Электронно-библиотечная система издательства «Лань»

Договор № 33.03-Р-3.1-5182/2022 от 26.09.2022г.

ИКЗ : 22 1 7707072637 770701001 0054 000 5829 244

Договор № 33.03-Л-3.1-5181/2022 от 26.09.2022г.

ИКЗ : 22 1 7707072637 770701001 0054 000 5829 244

Срок действия с 26.09.2022г. по 25.09.2023г.

Образовательная платформа «Юрайт»

Договор 33.03-Л-3.1-4377/2022 на оказание услуг по предоставлению доступа к образовательной платформе

ИКЗ 22 1770707263777070100100040015814244 от 16.03.2022г., срок действия с 16.03.2022 по 15.03.2023г.

Доступ только для зарегистрированных пользователей.

10.3 Информационные и информационно-образовательные ресурсы

При освоении дисциплины студенты могут использовать информационные и информационно-образовательные ресурсы следующих порталов и сайтов:

1. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам». URL: <http://window.edu.ru/> (дата обращения: 20.06.2022).
2. Библиотека НИ РХТУ им. Д.И. Менделеева / Официальный сайт НИ РХТУ им. Д.И. Менделеева. Режим доступа: <http://www.nirhtu.ru/administration/library/elibrary.html>. (дата обращения: 20.06.2022).
3. Электронный фонд правовой и нормативно-технической документации [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/>(дата обращения: 20.06.2022).
4. Физика, химия, математика студентам и школьникам Образовательный проект А.Н. Варгина http://www.ph4s.ru/book_him_polimer.html (дата обращения 26.06.2022)
5. Сайт кафедры ХТОВиПМ : <https://moodle.nirhtu.ru/course/index.php?categoryid=28>
6. Всероссийский Институт Научной и технической информации (ВИНИТИ) : www.viniti.ru
7. Научная электронная библиотека : <http://Elibrary.ru>.
8. Сайт лаборатории ACD/Labs – ведущей компании в мире по разработке компьютерных средств решения структурных задач органической химии по данным молекулярной спектроскопии [Электронный ресурс] – Режим доступа: www.chemlabs.ru

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспеченные доступом в электронную информационно-образовательную среду Института

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Приспособленность помещений для использования инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья
Лекционная аудитория и аудитория для проведения практических занятий, консультаций, текущего контроля и промежуточной успеваемости (№ 355, 460), ул. Дружбы, д. 8б.	Комплекты учебной мебели (столы, стулья, меловая доска), учебно-наглядные пособия (периодическая система Д.И. Менделеева)	приспособлено
Учебный класс для проведения занятий по освоению навыков работы с компьютерными системами установления строения органических соединений и выполнения индивидуальных заданий (№386), ул. Дружбы, д. 8б.	Персональные компьютеры (4 шт.), лазерный принтер, ксерокс, информационные и демонстрационные материалы на электронных носителях) с локальной сетью, обеспечивающий доступ к ресурсам Интернет и компьютерным системам установления строения органических соединений кафедры ХТОВиПМ (ZaIR, ИПС-МС и ХимАрт)	приспособлено
Аудитория для самостоятельной работы студентов №390 и учебный класс №386 ул. Дружбы, д. 8б.	Учебно-методическая литература кафедры ХТОВиПМ, персональные компьютеры (6 шт.) с возможностью просмотра видеоматериалов и презентаций, лазерный принтер, ксерокс. Доступ в Интернет, к ЭБС, электронным образовательным и информационным ресурсам, базе данных электронного каталога НИ РХТУ, системе управления учебными курсами Moodle. Переносная презентационная техника (постоянное хранение в ауд. № 386)	приспособлено

* Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья есть возможность проводить лекционные занятия и занятия семинарского типа на 1-ых этажах учебных корпусов. Возле входных дверей в учебные корпуса установлен звонок в дежурную сотруднику. Предусмотрены широкие дверные проемы. Имеются специализированные кабинеты для самостоятельной и индивидуальной работы, оснащенные ПК.

11.1. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Ноутбук Acer 2,2 ГГц, с оперативной памятью 2 Гбайт, жестким диском 160 Гбайт с возможностью просмотра видеоматериалов и презентаций, с неограниченным доступом в Интернет, к ЭБС, электронным образовательным и информационным ресурсам, базе данных электронного каталога Института, системе управления учебными курсами Moodle, учебно-методическим материалам.

Проектор BenQ "MX 503", Экран Lumien Eco View, Сканер CanoScan 4400F

11.2. Программное обеспечение

1. Операционная система (MS Windows, MS Access, MS Visual Studio, MS Office 365A1, действует бессрочная лицензия по подписке Azure Dev Tools for Teaching (бывш. Microsoft Imagine Premium) ИД пользователя: 000340011208DF77, идентификатор подписки: a936248f-3805-4c6a-a64f-8c344976ef6d, идентификатор подписчика: ICM-164914, ИД учетной записи: Novomoskovsk Institute (branch) of the Federal state budgetary educational institution of higher education "Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia".
2. Табличный процессор (LibreOffice Calc) распространяется под лицензией LGPLv3
3. Текстовый редактор (LibreOffice Writer) распространяется под лицензией LGPLv3)
4. Редактор презентаций (LibreOffice Impress) распространяется под лицензией LGPLv3)
5. Архиватор 7zip (распространяется под лицензией GNU LGPL license)
6. Архиватор Zip ([public domain](#))
7. Adobe Acrobat Reader - ПО [Acrobat Reader DC](#) и мобильное приложение Acrobat Reader являются бесплатными и доступны для корпоративного распространения (<https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volume-distribution.html>)
8. Браузер Mozilla FireFox (распространяется под лицензией Mozilla Public License 2.0 (MPL))
9. ChemSketch v.12.01 (распространяется под лицензией Freeware)

Кафедральные информационные ресурсы и программные средства для изучения дисциплины:

1. Базы данных по различным видам молекулярных спектров (МС, ИК, ЯМР)
2. Компьютерные системы для решения задач исследования строения органических соединений по спектральным данным (ИПС-МС, ZaIR, ХимАрт).

14. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Оценка «зачтено» выставляется в случае, если студент успешно выполнил и защитил контрольные работы и индивидуальное задание, ответил на все вопросы, связанные с изучением дисциплины, свободно оперирует приобретенными знаниями, умениями и навыками по всем разделам дисциплины в рамках профессиональных компетенций ПК-4, ПК-5 и индикаторов ПК-4.2, ПК-5.4:

ПК-4: готов применять цифровые информационные технологии для решения технологических задач в профессиональной области.

ПК-5 : способен осуществлять проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований, выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок, готовность осуществлять подготовку документации, проектов планов и программ проведения отдельных этапов работ

ПК-4.2: Использует сетевые компьютерные технологии для получения информации в сфере своей профессиональной деятельности

ПК-5.4: Готов использовать знания основных физических теорий для решения возникающих физических задач, самостоятельного приобретения физических знаний, для понимания принципов работы приборов и устройств, в том числе выходящих за пределы компетентности конкретного направления

Оценка «не зачтено» выставляется в случае, если студент демонстрирует полное отсутствие или явную недостаточность (менее 33%) знаний, умений в соответствии с планируемыми результатами обучения.

Аннотация рабочей программы дисциплины
«Компьютерные методы установления строения органических соединений»

1. Общая трудоемкость - (з.е./час) 2/72. Контактная работа 32 час., из них: лекционные 16 час., практические занятия 16 час. Самостоятельная работа студента 40 час. Форма промежуточного контроля: зачет. Дисциплина изучается на 3 курсе в 6 семестре.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в раздел факультативных дисциплин модуля «Химическая технология органических веществ», блок **ФТД.В.01.** (6 семестр, 3 курс). Для ее освоения необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин: органическая химия, прикладная информатика, физические методы исследования органических соединений, компьютерные методы идентификации органических соединений.

3. Цель изучения дисциплины: формирование профессиональных компетенций ПК-4, ПК-5 и индикаторов их достижений ПК-4.2, ПК-5.4.

ПК-4: готов применять цифровые информационные технологии для решения технологических задач в профессиональной области.

ПК-5 : способен осуществлять проведение работ по обработке и анализу научно-технической информации и результатов исследований, выполнять эксперименты и оформлять результаты исследований и разработок, готовность осуществлять подготовку документации, проектов планов и программ проведения отдельных этапов работ

ПК-4.2: Использует сетевые компьютерные технологии для получения информации в сфере своей профессиональной деятельности

ПК-5.4: Готов использовать знания основных физических теорий для решения возникающих физических задач, самостоятельного приобретения физических знаний, для понимания принципов работы приборов и устройств, в том числе выходящих за пределы компетентности конкретного направления

4. Содержание дисциплины

Модуль 1. Предмет и задачи дисциплины.

Модуль 2. Метод масс-спектрометрии. Общая характеристика, теоретические основы и возможности метода при установлении строения неизвестных органических соединений.

Модуль 3. Метод ядерного магнитного резонанса. Общая характеристика, теоретические основы и возможности метода при установлении строения неизвестных органических

Модуль 4. Метод инфракрасной спектроскопии. Общая характеристика, теоретические основы и возможности метода при установлении строения неизвестных органических

Модуль 5. Литературные коллекции и компьютерные банки данных по молекулярной спектроскопии. Обзор наиболее известных коллекций и баз данных по масс-спектрометрии, ИК спектроскопии и спектроскопии ЯМР.

Модуль 6. Компьютерные средства и методы решения задачи установления строения органических соединений по данным молекулярной спектроскопии. Искусственный интеллект, библиотечный поиск, распознавание образов, искусственные нейронные сети.

Модуль 7. Информационно-поисковые системы по молекулярной спектроскопии. Назначение, организация и основные элементы.

Модуль 8. Информационно-логические системы. Назначение, организация и основные элементы.

Модуль 9. Экспертные системы. Назначение, организация и основные элементы.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, обеспечивающие достижение планируемых результатов освоения образовательной программы

В результате изучения дисциплины в рамках компетенций ПК-4 и ПК-5 студент должен :

Знать:

- теоретические основы и возможности современных спектральных методов (МС, ИК и ЯМР) при решении задачи установления строения органических соединений
- традиционные и компьютерные «технологии» решения данной задачи с помощью этих методов
- современное состояние дел в области информационного и программного обеспечения решения данной задачи и сопутствующих ее проблем.
- компьютерные технологии обработки результатов спектрального анализа

Уметь:

- осуществить выбор необходимых спектральных методов для решения конкретной структурной задачи, анализировать полученные спектры и принимать обоснованные решения о строении изучаемого соединения с использованием литературных данных и программных средств, доступных в НИ РХТУ и через Интернет

Владеть:

- современными компьютерными методами решения задачи установления строения неизвестных органических соединений по спектральным данным (МС, ЯМР, ИК).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«Компьютерные методы установления строения органических соединений»

Номер изменения/дополнения	Содержание дополнения / изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от _____ 202__ г.
2		протокол заседания Ученого совета № _____ от _____ 202__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от _____ 202__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от _____ 202__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от _____ 202__ г.