

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по образовательной деятельности КФУ
Проф. Д.А. Таюрский

» 20__г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Современные инновационные методы в химии ФТД.Б.1

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Аналитическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Медянцева Э.П., Сальников Ю.И.

Рецензент(ы):

Евтюгин Г.А., Улахович Н.А.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Евтюгин Г. А.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__г

Регистрационный No 748019

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Медянцева Э.П.
Кафедра аналитической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова ,
Elvina.Medyantseva@kpfu.ru ; Сальников Ю.И.

1. Цели освоения дисциплины

Курс предназначен для изучения и обобщения современных инновационных методов, используемых при исследовании кислотно-основных равновесий и процессов комплексообразования.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "ФТД.Б.1 Факультативные дисциплины" основной образовательной программы 04.03.01 Химия и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 1, 2, 3, 4 курсах, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 семестры.

Дисциплина "Современные инновационные методы" относится к разделу Б1 профессионального цикла профиля "Неорганическая химия"(факультатив). Основывается на фундаментальных положениях общей и неорганической химии: кислотно-основных равновесиях и процессах комплексообразования в растворах.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных.

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

Основные принципы обучающих и контролирующих программ

2. должен уметь:

Применять на практике расчеты с использованием основных обучающих и контролирующих программ

3. должен владеть:

Основными приемами расчета и графических построений зависимостей

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Основные принципы обучающих и контролирующих программ

Применять на практике расчеты с использованием основных обучающих и контролирующих программ

Владеть основными приемами расчета и графических построений зависимостей

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зачетных(ые) единиц(ы) 252 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: отсутствует в 1 семестре; отсутствует во 2 семестре; зачет в 3 семестре; отсутствует в 4 семестре; отсутствует в 5 семестре; отсутствует в 6 семестре; отсутствует в 7 семестре; зачет в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практи- ческие занятия	Лабора- торные работы	
1.	Тема 1. Инновационные методы в неорганической химии.	1	1-6	0	15	0	
2.	Тема 2. Инновационные методы в неорганической химии.	2	1-6	0	15	0	
3.	Тема 3. Инновационные методы в аналитической химии.	3	1-8	0	25	0	
4.	Тема 4. Инновационные методы в органической химии.	5	1-8	0	15	0	
5.	Тема 5. Инновационные методы в физической химии.	5	9-16	0	15	0	
6.	Тема 6. Инновационные методы в органической химии.	6	1-8	0	15	0	
7.	Тема 7. Инновационные методы в физической химии.	6	9-16	0	15	0	
8.	Тема 8. Инновационные методы в курсе "Химическая технология".	7	1-8	0	15	0	
9.	Тема 9. Инновационные методы в курсе "Высокомолекулярные соединения".	8	1-8	0	15	0	
10.	Тема 10. Инновационные методы в аналитической химии.	4	9-12	0	5	0	
.	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	Зачет
.	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	Зачет
	Итого			0	150	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Инновационные методы в неорганической химии.

практическое занятие (15 часа(ов)):

Инновационные методы в неорганической химии. Использование программы CPESSP для расчета констант кислотно-основного равновесия в растворах. равновесий в растворах координационных соединений. Использование программы CPESSP для расчета констант равновесий координационных соединений в растворах по данным pH-метрических измерений. Использование программы CPESSP для расчета констант равновесий координационных соединений в растворах по спектофотометрическим данным. Использование программы CPESSP для расчета констант равновесий координационных соединений в растворах по релаксационным данным. Использование программы CPESSP для расчета констант равновесий координационных соединений в растворах по потенциометрическим данным. Использование программы CPESSP для расчета констант равновесий координационных соединений в растворах по данным растворимости.

Тема 2. Инновационные методы в неорганической химии.

практическое занятие (15 часа(ов)):

Инновационные методы в неорганической химии. Использование мультимедийных обучающих программ по разделу "Химия элементов"

Тема 3. Инновационные методы в аналитической химии.

практическое занятие (25 часа(ов)):

Инновационные методы в аналитической химии. Знакомство с программой для построения диаграмм распределения мольных долей кислот и оснований в зависимости от pH растворов. Построение кривых распределения форм существования кислот и оснований при различных pH под руководством преподавателя. Построение кривых распределения форм существования многоосновных кислот и оснований при различных pH по заданию преподавателя. Нахождение по кривым распределения области pH существования определенных форм кислоты или основания, нахождение констант кислотности и основности многоосновных соединений. Знакомство с компьютерными программами, обеспечивающими построение кривых титрования. Практическая реализация особенностей построения кривых титрования кислот и оснований с использованием компьютерных программ. Использование компьютерных программ для построения кривых титрования с использованием реакций комплексообразования. Построение кривой конкретного соединения по заданию преподавателя.

Тема 4. Инновационные методы в органической химии.

практическое занятие (15 часа(ов)):

Инновационные методы в органической химии. Использование полуэмпирических методов расчета для определения геометрических параметров, молекулярно-орбитальных характеристик и зарядового распределения в органических молекулах. Использование неэмпирических методов расчета для определения геометрических параметров, молекулярно-орбитальных характеристик и зарядового распределения в органических молекулах. Создание баз данных органических соединений с использованием программ ChemAxon.

Тема 5. Инновационные методы в физической химии.

практическое занятие (15 часа(ов)):

Инновационные методы в физической химии. Использование мультимедийных обучающих программ для изучения физической химии. Использование мультимедийных контролирующих программ для изучения физической химии.

Тема 6. Инновационные методы в органической химии.

практическое занятие (15 часа(ов)):

Инновационные методы в органической химии. Поиск органических соединений в базах данных по субструктуре, суперструктуре, схожести и комплексный поиск (с условиями). Поиск баз данных органических реакций: создание, анализ. Использование программы PASS для предсказания биологической активности органических соединений. Применение программы ISIDA MLR для изучения закономерностей "структура-свойство" органических соединений. Использование виртуальных лабораторий по хемоинформатике для поиска закономерностей "структура-свойство" и предсказания свойств органических соединений.

Тема 7. Инновационные методы в физической химии.

практическое занятие (15 часа(ов)):

Инновационные методы в физической химии. Математическая обработка результатов лабораторного практикума по физической химии при использовании УЛК "Химия". Знакомство с электронными ресурсами крупнейших библиотек.

Тема 8. Инновационные методы в курсе "Химическая технология".

практическое занятие (15 часа(ов)):

Инновационные методы в курсе "Химическая технология". Поиск научной химической информации в интернете по курсу "Химическая технология". Знакомство с полнотекстовыми электронными ресурсами крупнейших библиотек. Обучение поиску научной химической литературы на заданную тематику. Поиск патентной литературы, заявок на изобретение, открытий и т.д.

Тема 9. Инновационные методы в курсе "Высокомолекулярные соединения".

практическое занятие (15 часа(ов)):

Инновационные методы в курсе "Высокомолекулярные соединения". Поиск научной химической информации в интернете по курсу "Высокомолекулярные соединения". Практические занятия на ИК-Фурье спектрометре нового поколения IR Prestige 21. Обработка результатов лабораторного практикума по курсу "Высокомолекулярные соединения".

Тема 10. Инновационные методы в аналитической химии.

практическое занятие (5 часа(ов)):

Практическая реализация особенностей построения кривых титрования окислителей и восстановителей с использованием компьютерных программ.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Инновационные методы в неорганической химии.	1	1-6	Оформление отчета	35	Домашнее задание
2.	Тема 2. Инновационные методы в неорганической химии.	2	1-6	Оформление отчета	7	Домашнее задание

N	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
3.	Тема 3. Инновационные методы в аналитической химии.	3	1-8	Оформление отчета	6	Домашнее задание
4.	Тема 4. Инновационные методы в органической химии.	5	1-8	Оформление отчета	2	Домашнее задание
5.	Тема 5. Инновационные методы в физической химии.	5	9-16	Оформление отчета	4	Домашнее задание
6.	Тема 6. Инновационные методы в органической химии.	6	1-8	Оформление отчета	20	Домашнее задание
7.	Тема 7. Инновационные методы в физической химии.	6	9-16	Оформление отчета	22	Домашнее задание
8.	Тема 8. Инновационные методы в курсе "Химическая технология".	7	1-8			
9.	Тема 9. Инновационные методы в курсе "Высокомолекулярные соединения".	8	1-8	Оформление отчета	4	Домашнее задание
10.	Тема 10. Инновационные методы в аналитической химии.	4	9-12	Оформление отчета	2	Домашнее задание
	Итого				102	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Компьютерные программы, обеспечивающие наиболее употребляемые в аналитической химии расчеты.

Разбор конкретных вопросов в виде семинаров;
интерактивный опрос по разделам отдельных программ и практических вычислений

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Инновационные методы в неорганической химии.

Домашнее задание , примерные вопросы:

Инновационные методы обучения: моделирование процессов комплексообразования с помощью созданных на кафедре неорганической химии компьютерных программ.

Тема 2. Инновационные методы в неорганической химии.

Домашнее задание , примерные вопросы:

Представление отчета на тему "Количественное описание сложных равновесных и кинетических систем, постановка обратных химических задач; модели различных типов экспериментального материала".

Тема 3. Инновационные методы в аналитической химии.

Домашнее задание , примерные вопросы:

Оформление отчета на тему: 1. Обоснование и представление алгоритма построения диаграмм распределения различных форм кислот и основания. 2. Построения диаграмм распределения различных форм кислот и оснований в зависимости от pH растворов (конкретных соединений по выбору преподавателя).

Тема 4. Инновационные методы в органической химии.

Домашнее задание , примерные вопросы:

1. История моделирования "структура-свойство" SAR/QSAR/QSPR 2. Построение и валидация моделей 3. Предобработка данных 4. Удаление смесей, неорганических и металлоорганических соединений 5. Конвертация структур, удаление солей и выбор состояния ионизации 6. Нормализация специфических хемотипов, резонансных форм и таутомеров 7. Выявление дубликатов 8. Заключительная ручная проверка 9. Общие принципы построения моделей 10. Метод наименьших квадратов 11. Понятие об оверфиттинге и принцип оптимальной сложности моделей 12. Принципы отбора дескрипторов 13. Проблемы, связанные с отбором дескрипторов. 14. Общие принципы валидации моделей 15. Понятие о внутреннем и внешнем, перекрестном и скользящем контроле 16. Критерии оценки качества регрессионных моделей. 2. Интеграл перекрытия 3. Двухэлектронные интегралы - виды приближений 4. Приближения, используемые в полуэмпирических методах. 5. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием: методы MNDO, AM1, PM3. 6. Ограничения, общие для MNDO, AM1, PM3.

Тема 5. Инновационные методы в физической химии.

Домашнее задание , примерные вопросы:

1. Современные методы термического анализа материалов: - микро- и нанокалориметрия, - калориметрия в режиме температурной модуляции, - адиабатическая калориметрия. 2. Расчет сольватационных эффектов на основе ограниченного набора экспериментальных данных.

Тема 6. Инновационные методы в органической химии.

Домашнее задание , примерные вопросы:

1. Структура баз данных. 2. Виды поиска в химических базах данных. 3. Поиск по структуре, подструктуре, суперструктуре и по молекулярному сходству в базах данных различных типов. 4. Основные алгоритмы поиска. 5. Использование скринов. 6. Рекурсивный подход. Ульмановский подход. 7. Поиск в 3D базах данных. 8. Фармакофоры. 9. Жесткий и гибкий поиск. 10. Фармакофорный поиск. 11. Основные химические базы

Тема 7. Инновационные методы в физической химии.

Домашнее задание , примерные вопросы:

1) Основы предвидения каталитического действия. Корреляционные методы в кинетике и катализе. Проблема оптимального катализатора, принцип геометрического и энергетического соответствия. 2) Расчетные методы предсказания физико-химических свойств соединений, основаны на анализе соотношения ?структура-свойство?. 3) Физико-химические методы изучения новых материалов с уникальными свойствами: зондовая микроскопия, электронная микроскопия.

Тема 8. Инновационные методы в курсе "Химическая технология".

Тема 9. Инновационные методы в курсе "Высокомолекулярные соединения".

Домашнее задание, примерные вопросы:

Оформление отчета на тему "Новые композиционные материалы и методы их получения"

Тема 10. Инновационные методы в аналитической химии.

Домашнее задание, примерные вопросы:

1. Построение кривых титрования одноосновных и многоосновных кислот и оснований (конкретные соединения по выбору преподавателя). Анализ полученных кривых титрования. 2. Построения диаграмм распределения различных форм кислот и оснований в зависимости от pH растворов (конкретных соединений по выбору преподавателя).

Итоговая форма контроля

зачет (в 3 семестре)

Итоговая форма контроля

зачет (в 8 семестре)

Примерные вопросы к итоговой форме контроля

Зачет ставиться после представления отчета о выполненной практической работе.

7.1. Основная литература:

1. Аналитическая химия. Методы идентификации и определения веществ [Электронный ресурс] : учебник / М.И. Булатов [и др.] ; Под ред. Л.Н. Москвина. ? Электрон. дан. ? Санкт-Петербург : Лань, 2019. ? 584 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/112067>. ? Загл. с экрана.

2. Павлов Н.Н. Общая и неорганическая химия. [Электронный ресурс] - 3-е изд., испр., доп. - Санкт-Петербург: Лань, 2011. - 496 с.

Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4034

3. Свердлова Н.Д. Общая и неорганическая химия: экспериментальные задачи и упражнения. [Электронный ресурс] - Санкт-Петербург: Лань, 2013. - 352 с.

Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=13007

7.2. Дополнительная литература:

1. Математическая обработка результатов химического эксперимента: Учебно-методическое пособие [Электронный ресурс] / Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л.Г. Шайдарова, Ю.И. Сальников. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. - 60 с.

Режим доступа: http://kpfu.ru/docs/F910466741/Mat_ekperiment.pdf

2. Егоров, В.В. Неорганическая и аналитическая химия. Аналитическая химия [Электронный ресурс] : учебник / В.В. Егоров, Н.И. Воробьева, И.Г. Сильвестрова. ? Электрон. дан. ? Санкт-Петербург : Лань, 2014. ? 144 с. ? Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/45926>. ? Загл. с экрана.

7.3. Интернет-ресурсы:

ежедневные новости о достижениях в химии -

http://www.sciencedaily.com/news/matter_energy/chemistry/

инновации в химии полимеров - <http://www.polychemistry.com/>

новости из мира инноваций в химии - <https://connect.innovateuk.org/web/chemistryinnovationktn>

периодический обзор инноваций в химии - <http://www.rsc.org/chemistryworld/>

сайт Комитета США по инновациям в химии - <http://www.americanchemistry.com/Innovation>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Современные инновационные методы в химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Персональные компьютеры, программы по химическим расчетам

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки Аналитическая химия .

Автор(ы):

Медянцева Э.П. _____

Сальников Ю.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Евтюгин Г.А. _____

Улахович Н.А. _____

"__" _____ 201__ г.