

Аннотация РПД «ЭВМ в химических расчетах»

Данная дисциплина связана с предшествующими курсами физической химии, квантовой химии, строения вещества, информатики. Обучающийся должен знать основы химической термодинамики, квантовой химии и строения вещества. Обучающийся также должен иметь навыки практической работы с ЭВМ, желательно знание пакета Mathcad.

В ходе изучения данной дисциплины обучающиеся должны получить представление о моделировании равновесий в сложных многокомпонентных системах, о построении модели состояния комплексной частицы в растворе. Освоение данного курса необходимо для выполнения квалификационных работ в области неорганической химии и химии растворов.

Целями освоения дисциплины «ЭВМ в химических расчетах» являются: формирование у аспирантов понятий о теоретических основах этой дисциплины, ее особенностях, связи с другими науками и ее практической значимости. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о постановке обратных химических задач, включая математическую формализацию состояний модельного объекта и приемов оценивания меры расхождения экспериментального и теоретических полей.

После прохождения дисциплины «ЭВМ в химических расчетах» аспирант должен:

Знать:

- общие закономерности протекания химических реакций в растворах и твердой фазе, основы химической термодинамики и кинетики;

Уметь:

- представлять для расчета равновесные данные физико-химических методов,
- создавать компьютерные молекулярные модели

Владеть:

- теоретическими знаниями о химическом эксперименте и возможностях статистических представлений при качественном и количественном описании сложных химических систем.

Демонстрировать способность и готовность:

- применять полученные знания на практике.