

Дисциплина «ЭВМ в химических расчётах»

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.