

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный химико-фармацевтический университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации

**Аннотация рабочей программы дисциплины
Б1.О.12 Вычислительные методы в химии**

Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Профиль подготовки:	Синтез и анализ органических соединений
Форма обучения:	очная

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Компетенции, индикаторы и результаты обучения

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

ОПК-3.1 Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

Знать:

ОПК-3.1/Зн1 Знать теорию строения атома и химической связи, периодический закон, основные положения химической термодинамики и химической кинетики, коллигативные свойства растворов, положения теории электролитической диссоциации.

ОПК-3.1/Зн2 Знать классификацию и общие химические свойства основных классов неорганических соединений; химические свойства элементов различных групп и семейств Периодической системы и их важнейших соединений; номенклатуру, классификацию и химические свойства комплексных соединений

ОПК-3.1/Зн3 Знать цели и задачи численных методов расчетов, области их применения.

ОПК-3.1/Зн4 Знать методы описания химических равновесий в растворах сильных и слабых электролитов, буферных растворов; описание равновесий в гетерогенных системах, в растворах солей, подвергающихся гидролизу, в окислительно-восстановительных системах.

ОПК-3.1/Зн5 Знать способы выражения состава растворов; закон эквивалентов, координационную теорию строения комплексных соединений, классификацию и теорию кристаллического поля лигандов для комплексных соединений.

Уметь:

ОПК-3.1/Ум1 Уметь описывать строение атомов элементов, определять характеристики химической связи и объяснять пространственное строение молекул; решать расчетные задачи по разделам общей химии; записывать уравнения реакций в молекулярном и ионном виде; уравнивать окислительно-восстановительные реакции ионно-электронным методом

ОПК-3.1/Ум2 Уметь применять численные методы в задачах химической направленности

ОПК-3.2 Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

Знать:

ОПК-3.2/Зн1 Знать возможности современного программного обеспечения, применяемого для оценки результатов химического анализа

ОПК-3.2/Зн2 Знать программное обеспечение и методы, используемые при решении задач химической направленности

Уметь:

ОПК-3.2/Ум1 Уметь выбирать необходимое программное обеспечение в соответствии с поставленной задачей

ОПК-3.2/Ум2 Уметь использовать Matlab (Octave) для решения задач химической технологии

ОПК-3.2/Ум3 Уметь выбирать и использовать необходимое программное обеспечение в соответствии с поставленной задачей

ОПК-5 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности

ОПК-5.1 Применяет базовые знания об основных принципах, методах и свойствах информационных технологий при выборе программного обеспечения для целей решения профессиональных задач

Знать:

ОПК-5.1/Зн1 Знать основные принципы, методы и свойства информационных технологий при разработке схем получения органических (в том числе новых) соединений.

ОПК-5.1/Зн2 Знать основные принципы, методы и свойства ИТ при выборе программного обеспечения для целей решения профессиональных задач

ОПК-5.1/Зн3 Знать численные методы решения задач линейного и нелинейного программирования, решения дифференциальных уравнений, нахождения интегралов с помощью программного обеспечения

Уметь:

ОПК-5.1/Ум1 Уметь использовать информационные технологии при разработке схем получения органических (в том числе новых) соединений.

ОПК-5.1/Ум2 Уметь пользоваться программным обеспечением, используемым для решения профессиональных задач

ОПК-5.1/Ум3 Уметь численно решать задачи линейного и нелинейного программирования, решать дифференциальные уравнения, находить интегралы с помощью программного обеспечения.

Владеть:

ОПК-5.1/Нв1 Владеть навыками выбирать и использовать высокотехнологическое оборудование для анализа сырья, исходных реагентов и конечной продукции.

ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

ОПК-4.2 Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик

Знать:

ОПК-4.2/Зн1 Знать встроенные статистические и математические функции доступных пакетов программного обеспечения, позволяющие осуществить аппроксимацию результатов

ОПК-4.2/Зн2 Знать способы проверки линейной зависимости аналитического сигнала от концентрации и способы выявления отклонения от линейной регрессии

ОПК-4.2/Зн3 Знать методы обработки данных, аппроксимации и интерполяции

Уметь:

ОПК-4.2/Ум1 Уметь провести аппроксимацию полученных экспериментальных данных с использованием доступного программного обеспечения.

ОПК-4.2/Ум2 Уметь построить линейную зависимость аналитического сигнала от содержания вещества методом наименьших квадратов

ОПК-4.2/Ум3 Уметь обрабатывать данные, выполнять аппроксимацию и интерполяцию

Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина (модуль) Б1.О.12 «Вычислительные методы в химии» относится к обязательной части образовательной программы и изучается в семестре(ах): 4.

Предшествующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.О.10 Аналитическая химия;

Б1.О.04 Математика;

Б1.О.06 Общая и неорганическая химия;

Б1.О.09 Статистические методы анализа;

Б2.О.01(У) учебная практика (ознакомительная практика);

Б1.О.05 Физика и биофизика;

Б1.О.11 Физическая химия;

Последующие дисциплины (практики) по связям компетенций:

Б1.О.10 Аналитическая химия;

Б1.О.19 Информационные технологии в профессиональной деятельности;

Б1.О.15 Метрология в химическом анализе;

Б3.01(Д) Подготовка к защите и защита выпускной квалификационной работы;

Б2.О.02(Н) производственная практика (научно-исследовательская работа);

Б1.О.11 Физическая химия;

В процессе изучения дисциплины студент готовится к видам профессиональной деятельности и решению профессиональных задач, предусмотренных ФГОС ВО и образовательной программой.

2. Содержание разделов, тем дисциплин

Раздел 1. Введение в дисциплину. Решение уравнений.

Тема 1.1. Введение в дисциплину. Решение уравнений.

Введение в дисциплину. Действия над приближенными числами. Вычисления с помощью рядов. Оценка погрешностей. Приближенное решение алгебраических уравнений.

обучения	Общая гру (час	Общая гру (ЗЕ	Контактн (часы,	Консультац теоретического	Контактн на аттестацию в пер	Лекции	Практическ (ча	Самостоятел. студент	Промежуточн (ча
Четвертый семестр	72	2	44	2	2	18	22	28	Зачет
Всего	72	2	44	2	2	18	22	28	

Разработчик(и)

Кафедра высшей математики, кандидат технических наук, старший научный сотрудник
Капультцевич А. Е.