

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце: Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

Дата подписания: 06.06.2022 16:44:45

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Математическое моделирование химических равновесий

### Направление подготовки

04.03.01 Химия

### Направленность (профиль)

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 3 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Веселов И.Н. \_\_\_\_\_

Тверь, 2021

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины:**

*Цель* дисциплины: подготовка специалистов, владеющих теоретическими основами и практическими приемами математического моделирования химических равновесий.

Современный уровень развития электронно-вычислительной техники позволяет обрабатывать большой объем результатов физико-химического эксперимента, что создает условия для математического моделирования природы.

Метод математического моделирования стал наиболее фундаментальным методом кибернетики — науки об общих законах переработки информации в сложных системах, например, химических. По своей значимости этот метод сравним с экспериментально-наблюдательным и абстрактно-логическим методами. Построение адекватной модели объекта позволяет выработать рекомендации по управлению процессом и условиям проведения реального эксперимента. Совокупность вычислительных методов, алгоритмов решения этих задач для каждой области науки специфична. Поэтому и выделяется раздел математического моделирования в химии. Метод математического моделирования сложных равновесии на основе законов действующих масс, сохранения вещества и заряда, методов математической статистики и планирования эксперимента, современных вычислительных алгоритмов, является важнейшим разделом образовательной подготовки специалиста-аналитика, в значительной степени определяющим его потенциальные возможности и перспективы роста в избранной области. Кроме этого изучение настоящего курса необходимо в связи с актуальной задачей широкого внедрения ЭВМ в научно-исследовательскую практику химии.

*Задачи* освоения дисциплины: подготовка студентов, умеющими реализовать возможности, заложенные программное обеспечение для метода математического моделирования химических равновесий, умеющих применять этот метод к реальным химическим системам.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Учебная дисциплина «Математическое моделирование химических равновесий» входит в Элективные дисциплины 1 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина закладывает знания для подготовки выпускной работы, производственной практики, самостоятельной научной работы. Дисциплина непосредственно связана с дисциплинами «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Физическая химия» «Математика».

**3. Объем дисциплины: 3 зачетные единицы, 108 академических часов, в том числе:**

**контактная аудиторная работа:** лекции **18** часов, лабораторные работы **36** часов;  
**контактная внеаудиторная работа:** контроль самостоятельной работы – **10** часов;  
**самостоятельная работа:** **44** часа.

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
<p>ПК-1  Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации</p>	<p>ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР</p> <p>ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР</p> <p>ПК-1.3 Готовит объекты исследования</p>
<p>ПК-2  Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы</p>	<p>ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)</p> <p>ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)</p>

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**  
зачет в 6-м семестре.

**6. Язык преподавания русский.**