

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.9.1 Компьютерная химия

по направлению подготовки: 18.03.01 «Химическая технология»

по профилю «Технология тугоплавких неметаллических и силикатных материалов»

Квалификация выпускника: БАКАЛАВР

Выпускающая кафедра: ТНВМ

Кафедра-разработчик рабочей программы: «Технология неорганических веществ и материалов»

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Компьютерная химия» являются:

- а) получение знаний о программных средствах обработки информации;
- б) получение знаний о системах автоматизированного проектирования; оптимизации химико-технологических процессов и квантово-химических расчетов;
- в) получение навыков работы с программными продуктами на ПК.

2. Содержание дисциплины «Компьютерная химия»:

Обзор современного уровня техники и состояния компьютерных технологий. Программные продукты.

Универсальные моделирующие программы, используемые в химической технологии. Структура УМП, Задачи, решаемые с применением УМП, проблемы и перспективы их развития.

Основные возможности табличного процессора Microsoft Excel. Работа с формулами, таблицами, диаграммами, статистическая обработка данных.

Исследование и проектирование химико-технологических процессов с применением программы ChemCad. Основные сведения о программе, ее возможности. Требования программы, загрузка системы, режимы работы системы, структура окна, начало и завершение работы. Режим графического построения. Основные возможности программы для построения графических схем химико-технологических процессов. Режим моделирования технологического процесса. Выбор размерностей, выбор компонентов, выбор термодинамических моделей, задание параметров потоков и оборудования, запуск программ моделирования. Решение задач расчета материального баланса разделения смеси, баланса абсорбции, расчет кинетических параметров реактора с применением пакета ChemCad.

Обзор пакетов квантово-химических расчетов химических реакций.

Системы автоматизированного проектирования. История возникновения и развития САПР; задачи, функции и структура САПР.

Защита информации в компьютерных сетях.

3. В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать:

- а) возможности современных компьютерных технологий;
- б) области применения пакетов прикладных программ в химической технологии;
- в) основные принципы работы с программными пакетами ChemCad и Excel, Гауссиан и др.

2) Уметь:

- а) работать с формулами, таблицами и диаграммами в программе Excel;

- б) работать в режиме графического построения в программе ChemCad;
 - в) работать в режиме моделирования в программе ChemCad.
- 3) Владеть:
- а) знаниями о программных средствах обработки информации;
 - б) навыками работы с программными продуктами на персональных компьютерах.

Зав. каф. ТНВМ



Хацринов А.И.

