

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Кемеровский государственный университет»  
Кафедра «Химии твердого тела»



УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по НРиИ  
К.Е. Афанасьев  
\_\_\_\_\_ 2012 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**ФД.А.04 «КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ»**

*для аспирантов специальности*  
*02.00.04 – Физическая химия*

*Квалификация (степень)*  
*Кандидат наук*

Кемерово 2012 г.

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 02.00.04 - физическая химия, в соответствии с Программой-минимум кандидатского экзамена по специальности 02.00.04 – «Физическая химия» по химическим наукам, утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ №274 от 08.10.2007 г., и учебным планом КемГУ по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

Составитель рабочей программы: Якубик Д.Г., доцент кафедры «Химия твердого тела», кандидат химических наук.

Рабочая программа дисциплины обсуждена на заседании кафедры химии твердого тела

Протокол № 10 от « 31 » мая 201 2 г.  
Зав. кафедрой ХТТ \_\_\_\_\_ Захаров Ю.А.  
(подпись) Ф. И. О

Рабочая программа утверждена на заседании ученого совета химического факультета протокол № 11 от 28.05.2012

Декан химического факультета

 А.А. Мороз

Начальник отдела аспирантуры и докторантуры

 М.И. Рябова

« 25 » 06 2012 г.

## 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Компьютерная химия" является получение компетенций, необходимых для проведения квалифицированного анализа экспериментальных данных в автоматизированных системах обработки информации, а также представления результатов научных исследований.

Предметом дисциплины «Компьютерная химия» являются алгоритмы, математические модели, параметрические и непараметрические методы обработки и анализа химических данных.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина "Компьютерная химия" относится к циклу факультативных дисциплин.

## 3. Требования к знаниям и умениям

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

**Иметь представления** об основных направлениях использования компьютеров в химии; о возможностях и недостатках основных химических программных пакетов; об основных этапах организации сбора и основных методах анализа данных.

**Уметь** планировать и производить сбор данных; проводить первичную подготовку данных, фильтрацию выбросов; рассчитывать числовые характеристики для исследуемых переменных; выбирать подходящие программные инструменты для выполнения анализа данных; давать интерпретацию полученным результатам, оформлять результаты научной работы.

**Владеть** основными методики статистического анализа результатов эксперимента, анализа статистических гипотез, аппроксимации экспериментальных данных.

#### 4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетных единиц, 72 часа.

##### 4.1 Лекционные (теоретические) занятия

№ раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Трудоемкость, часов
1	2	3	4
1.	Использование компьютеров для представления результатов химических исследований	Классификация компьютерных программ. Программы для обработки текстов и табличных данных. Базы данных. Компьютерные презентации	2
2.	Обработка экспериментальных данных	Предварительный (разведочный) анализ. Теория погрешностей. Исключение грубых промахов и систематических погрешностей. Корреляционный анализ. Метод максимального правдоподобия. Регрессионный анализ. Статистическая оценка гипотез. Аппроксимация экспериментальных данных непрерывными кривыми. Анализ сложных спектров	6
<b>Итого</b>			<b>8</b>

##### 4.2. Практические (семинарские) занятия - нет

### 4.3. Лабораторные занятия

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость, часов
1	2	3	4
1.	Использование компьютеров для представления результатов химических исследований	Поиск информации в базах данных. Оформление результатов работы в виде презентации.	2
2.	Обработка экспериментальных данных	Предварительный (разведочный) анализ. Погрешности прямых и косвенных измерений Исключение грубых промахов и систематических погрешностей.	2
3.		Построение статистической модели. Статистическая оценка гипотез	2
4.		Метод наименьших квадратов. Аппроксимация экспериментальных данных непрерывными кривыми.	2
5.		Анализ сложных спектров	2
<b>Итого</b>			<b>10</b>

#### 4.4. Самостоятельная работа аспиранта

Наименование раздела дисциплины	Вид самостоятельной работы	Трудоемкость, часов
1. Координационная теория Вернера	Обработка текстов и табличных данных	12
2. Обработка экспериментальных данных	Теория погрешностей результатов эксперимента.	6
	Характеристики случайных величин	6
	Основные функции распределения и их свойства	6
	Статистическая оценка гипотез	6
	Подготовка и защита итоговой практической работы	18
	<b>Итого</b>	<b>54</b>

##### 1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1. Ананьев В.А. Анализ экспериментальных данных. Кемерово, 2009
2. Бутырская Е.В. Компьютерная химия основы теории и работа с программами Gaussian и Gauss View / У.В. Бутырская. –М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2001. – 218 с.

##### Сайты в Интернете

1. [www.chemometrics.ru](http://www.chemometrics.ru)
  2. Журналы американского химического общества [www.acs.org](http://www.acs.org)
  3. Научная электронная библиотека <http://elibrary.ru>
- 2.