

**Программа вступительного испытания по предмету «Цифровая химия»  
для поступающих на образовательную программу магистратуры  
«Цифровые технологии в химии»  
направления 09.04.03 «Прикладная информатика»**

Вступительное испытание состоит из двух разделов: тестирование и список открытых вопросов.

Максимальное количество баллов за вступительное испытание – 100 баллов.

**Раздел 1.** Тестирование состоит из 20 вопросов по химии, физике и информатике максимальное количество баллов за тестирование 60.

**Основные темы для формирования вопросов тестирования**

**Блок «Химия»**

Строение вещества и химическая связь. Строение атома. Уравнение Шредингера. Атомная орбиталь. Квантовые числа. Радиальная и угловая составляющая волновой функции. Химическая связь. Типы химической связи. Периодический закон и периодическая система элементов. Термодинамические и кинетические характеристики реакций. Условия протекания реакций. Кинетика и механизм химических реакций. Скорость химической реакции. Химическое равновесие. Константа химического равновесия.

Термодинамические потенциалы. Фундаментальные уравнения Гиббса. Химический потенциал. Уравнение Гиббса-Гельмгольца. Соотношения Максвелла. Условия равновесия в гетерогенной системе. Правило фаз. Условия устойчивости. Диаграмма Р-Т однокомпонентной системы. Уравнение Клаузиуса – Клапейрона. Критическая точка равновесия жидкость-газ.

**Блок «Физика»**

Кинематика материальной точки. Динамика материальной точки. Законы сохранения энергии, импульса, момента импульса. Системы отсчета. Колебательное движение. Механика жидкостей и газов. Волновые процессы.

Статистический подход к описанию молекулярных явлений. Понятие температуры. Распределение молекул по скоростям. Броуновское движение. Поверхностное натяжение. Электростатика. Постоянный электрический ток. Переменный синусоидальный ток. Механизмы электропроводности.

**Блок «Информатика»**

Машинная арифметика, фундаментальные типы переменных, точность вычислений. Понятие алгоритма и алгоритмизация. Принципы работы вычислительных систем. Операционные системы, их функции. Аппаратное обеспечение компьютера. Компьютерные сети. Хранение данных. Структуры данных. Электронные таблицы. Графы.

## Раздел 2. Список открытых вопросов

Абитуриент должен ответить на 2 открытых вопроса.

Ответ на вопрос не должен превышать 2000 символов.

Максимальная оценка за каждый вопрос 20 баллов.

### Ориентировочные темы открытых вопросов

1. Направления применения компьютерного моделирования в химии.
2. Тренды в применении искусственного интеллекта в химии и химическом производстве.
3. Цифровизация предприятия на примере химического производства.
4. Применение информационных технологий в химическом исследовании

### Критерии оценивания

Критерий оценивания	Баллы
Изложение затрудняет проведение экспертизы; содержит ошибки в научных терминах; содержит пунктуационные, орфографические, синтаксические и лексические ошибки	0 – 3
Изложено четко, научным языком; суть вопроса раскрыта не полностью; содержит пунктуационные, орфографические, синтаксические и лексические ошибки	4 – 7
Изложено четко, научным языком; суть вопроса раскрыта полностью и аргументировано; ошибки отсутствуют	8 – 10

### Раздел 3. Информационные источники

1. Суворов А. В. Общая и неорганическая химия в 2 т. Том 1 : учебник для — Москва : Издательство Юрайт, 2023
2. Неорганическая химия : в 3-х т., учебник для студентов вузов, обучающихся по направлению "Химия" и специальности "Химия", ред. Ю. Д. Третьяков. - М., 2012.
3. Шрайвер Д. Неорганическая химия : в 2-х т., пер. с англ - М., 2013.
4. Трофимова Т.И. Курс физики: учеб. пособие для вузов — М.: Издательский центр «Академия», 2006. — 560 с.
5. Савельев И.В. Курс общей физики / в 3-х тт. СПб: Изд-во «Лань». (Т.1., Т.2., Т.3.)
6. Кузнецов С.Д. Базы данных: языки и модели. Учебник. М.: Бином-Пресс, 2008.
7. Кормен Т., Лейзерсон Ч., Ривест Р. Алгоритмы, построение и анализ. М.: МЦНМО, 8. 2000.
9. Танненбаум Э., Уэзеролл Д. Компьютерные сети. СПб.: Питер, 2003.
10. Танненбаум Э. Архитектура компьютера. 6-е изд. СПб.: Питер, 2021.

## **Раздел 4. Организационно-методические указания**

### **Длительность вступительного испытания**

- Три астрономических часа (180 минут).

### **Форма вступительного испытания**

- Вступительный экзамен проводится в письменной форме без использование каких-либо информационных источников во время экзамена.
- В зависимости от порядка проведения испытания, задание выполняется в электронной форме, либо в простой письменной (от руки) форме.
- В случае выполнения экзамена в простой письменной форме, ответы должны быть написаны аккуратно и разборчиво, затем отсканированы или сфотографированы для передачи проверяющим в качестве, не допускающем неоднозначного прочтение написанного.

### **Структура и содержание вступительного испытания**

Экзаменационное задание включает два раздела.

1. Тестирование (Раздел 1 данного документа). Абитуриент проходит тестирование по вопросам из блоков Раздела 1.
2. Ответы на открытые вопросы. Абитуриент письменно отвечает на набор вопросов (Раздел 2 данного документа). Рекомендуемый объем ответа – не более 2000 символов на один вопрос.

Критерии оценивая открытых вопросов изложены в соответствующем разделе.