

Программа вступительного испытания

по предмету «**Цифровая химия**»

для поступающих на образовательную программу магистратуры

Цифровые технологии в химии (с дополнительной квалификацией «Специалист по тестированию в области информационных технологий»)

направления подготовки 09.04.03 «Прикладная информатика»

Раздел 1. Организационно-методический раздел

Длительность вступительного испытания

180 минут (3 астрономических часа).

Форма вступительного испытания

Вступительный экзамен проводится в письменной форме без использования каких-либо информационных источников во время экзамена.

Задание выполняется в электронной форме с использованием программных средств, не предоставляющих возможности ввода формул и форматированного текста, математические формулы рекомендуется вводить в формате (La)TeX.

Максимальное количество баллов за вступительное испытание – 100 баллов.

Структура и содержание вступительного испытания

Вступительное испытание состоит из двух разделов:

1. Тестирование. Тестирование состоит из 20 вопросов по общей и неорганической, аналитической, физической и органической химии, за каждый вопрос выставляется 1.5 балла, максимальное количество баллов за тестирование 30.

2. Список открытых вопросов. Абитуриент должен ответить на 2 открытых вопроса. Ответ на вопрос не должен превышать 2000 символов. Максимальная оценка за каждый вопрос 35 баллов.

Раздел 2. Темы для формирования вопросов тестирования

Блок 1. «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 2. «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 3. 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

1. Четкость и научность изложения.

Изложено четко и на научном языке, демонстрирует глубокое понимание темы.

2. Полнота и аргументированность раскрытия сути вопроса.

Суть вопроса раскрыта полностью и аргументировано, с использованием примеров и/или литературных данных.

3. Грамотность и корректность текста.

Отсутствие пунктуационных, орфографических, синтаксических и лексических ошибок.

4. Личное мнение и его обоснование.

Содержит корректно сформулированное личное мнение, которое обосновано и подкреплено аргументами.

5. Образовательный опыт.

Содержит информацию о личном образовательном опыте.

6. Планируемый образовательный трек.

Содержит информацию о планируемой образовательной траектории, что демонстрирует мотивацию и цели кандидата.

7. Инновационность и оригинальность подхода.

Демонстрирует оригинальный и нешаблонный подход к рассмотрению темы, что свидетельствует о креативности и аналитических способностях кандидата.

- Каждый критерий оценивается от 0 до 5 баллов по следующей шкале:
- Полное несоответствие критерию – 0 баллов
- Преимущественное несоответствие критерию – 1 балл
- Преимущественное соответствие критерию – 3 балла
- Полное соответствие критерию – 5 баллов

Раздел 4. 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, 2000.
8. 2000.
9. Танненбаум Э., Уэзеролл Д. Компьютерные сети. СПб.: Питер, 2003.
10. Танненбаум Э. Архитектура компьютера. 6-е изд. СПб.: Питер, 2021.