

《化工计算》教学标准

制定人：王宜民

课程名称：化工计算

学时：36 学分：2

先修课程：无机化学 分析化学

适用专业：应用化工技术 分析检验技术

开课学期：第四学期

一、课程性质与任务

随着计算机科学与技术的高速发展及其与传统化学、化工学科的不断交叉、渗透与整合，现代计算机技术正在化学、化工专业的科研、生产、教学中起到日益重要的作用。计算机在化学、化工专业的应用已不仅局限于传统的办公、图形处理等范围。在化学品开发、反应机理研究、设备设计、过程控制、工艺优化、辅助教学等领域，计算化学和计算化学工程的重要作用日益凸显。对于化学、化工专业的学生和科研人员，熟练应用计算机解决学习、科研、工作中面临的各种问题已成为必备的基本技能。

本课程以实际分析检测中的应用例子为对象，在叙述和分析中将实验设计与数据处理、化学化工计算通过学习，使学生应用计算机解决分析化学、仪器分析领域一些常见问题的能力在实践中得到培养和提高，并对化工常用软件有较好的了解和掌握，是化工类专业的专业选修课程。

二、课程教学的基本要求

通过本课程的学习，使学生初步掌握利用相关软件和 internet 网络进行分析计算的能力、提升实验数据处理的能力。

三、课程教学内容

第 1 章 Excel 与标准溶液的计算 讲授 2 学时 上机 2 学时

- (1) 质量分数浓度计算；
- (2) 物质的量浓度计算；
- (3) 质量浓度计算；
- (4) 体积分数浓度计算

第 2 章 Excel 与滴定分析数据的计算 讲授 4 学时 上机 4 学时

- (1) 减量称量计算；

(2) 溶液温度校正体积计算;

(3) 滴定实际消耗体积计算;

(4) 检测样品浓度计算;

第3章 Excel 与电位滴定分析数据的计算 讲授 4 学时 上机 4 学时

(1) 体积变量计算;

(2) 电动势变量计算;

(3) 一阶微商计算;

(4) 二阶微商计算;

(5) 计量点的计算;

第4章 Excel 与线性回归方程的建立 讲授 4 学时 上机 4 学时

(1) 数据表的整理;

(2) 作图;

(3) 图表编辑;

第5章 Origin 软件在分析化学实验数据处理的应用 讲授 2 学时 上机 2 学时

(1) 软件的操作使用;

(2) 数据实例应用;

(3) 作图;

(4) 图表编辑;

第6章 Chemsk 软件在有机化学分子结构式绘制的应用 讲授 2 学时 上机 2 学时

(1) 软件的操作与使用;

(2) 分子结构实例讲解;

(3) 分子结构实例上机操作;

四、课程考核

该课程为考查课。

总评成绩=平时成绩(含作业和考勤)+期末成绩

其中:

平时成绩(含作业和考勤) 占 30%

期末成绩 占 70%