

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 06.06.2022 16:44:45
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf75f08

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»



Утверждаю:

Руководитель ООП:

М.Г. Виноградова

«21» 09 20 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)
МЕТОДЫ РАСЧЁТА СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
СТРУКТУР

Направление подготовки
04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль) подготовки

Физическая химия

Для аспирантов очной и заочной форм обучения

Подготовка кадров высшей квалификации

Составитель: д.х.н., проф. Виноградова М.Г.

Тверь, 2017

I. Аннотация

1. Наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

Методы расчёта свойств молекул и кристаллических структур.

2. Цель и задачи дисциплины

Цель дисциплины - освоение основных с идей и методов стереохимии, составляющих теоретический фундамент современной химической науки.

Задачи дисциплины

1. раскрыть основные принципы стереохимии;
2. научить аспирантов применять полученные знания для решения конкретных проблем химии;
3. повысить уровень профессиональной компетентности аспирантов посредством установления системы межпредметных связей содержания курса с содержанием профилирующих дисциплин.

3. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Методы расчёта свойств молекул и кристаллических структур» входит в раздел «Дисциплины по выбору». Дисциплина непосредственно связана с дисциплинами «Физическая химия», "Математическое моделирование в физической химии" .

4. Объем дисциплины :

___3___ зачетных единицы, ___108___ академических часов, в том числе
контактная работа: лекции ___4___ часов, практические занятия ___4___ часов,
самостоятельная работа: ___100___ часов.

5. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине , соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
--	--

<p>ОПК-1 обладать способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>Владеть:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. поиском информации в глобальной сети интернет; 2. современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований. <p>Уметь:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. определять симметрию (в виде точечной группы) любой молекулы и устанавливать (на языке симметрии) ее хиральность; 2. ввести валентные и невалентные взаимодействия атомов ; 3. применять полученные знания на практике. <p>Знать:</p> <p>химическое и стереохимическое строение, типы изомерии; закономерности в координации атомов; геометрическую конфигурацию молекул;</p>
<p>УК-5 обладать способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития</p>	<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - поиском информации в глобальной сети интернет; - современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - рассчитывать топологические индексы; - применять полученные знания на практике. <p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - понятие математической модели; - основные этапы математического моделирования.
<p>ПК-1 способность подбора инструментальной базы для решения научных, научно-прикладных задач</p>	<p>Владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований</p> <p>Уметь: применять методы математического моделирования</p> <p>Знать: Методы математического моделирования в физической химии</p>

6. Форма промежуточной аттестации — зачет.

7. Язык преподавания русский.