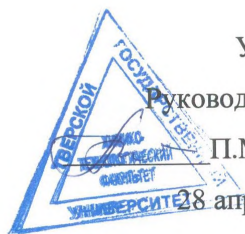


Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 06.06.2022 16:44:45
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

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



Утверждаю:
Руководитель ООП
П.М. Пахомов
28 апреля 2021 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)
Конформационный анализ

Направление подготовки
04.04.01 химия

Направленность (профиль)
Физическая химия

Для студентов 1 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Русакова Н.П. _____

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины является: знакомство студентов с основными представлениями конформационного анализа, занимающего ключевые позиции в современной химии.

Задачами освоения дисциплины являются:

- раскрытие основных принципов конформационного анализа
- применять конформационного анализа для решения конкретных проблем современной химии.

В качестве предмета дисциплина использует учение о пространственном (конформационном) строении молекул и его влиянии на свойства (физические, химические, биологические). Содержание практических занятий позволяет провести и моделирование конформационных преобразований в молекулах и топологический анализ электронной плотности получаемых устойчивых состояний.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина входит в обязательную часть Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина «Конформационный анализ» непосредственно связана со многими дисциплинами реализуемой ООП, он логически и содержательно-методически продолжает часть программ дисциплин, изучаемых в первом семестре, в то же время, его содержание дает базу и пересекается в понятийном и терминологическом аппарате с некоторыми дисциплинами второго и третьего. Так, в рамках курса «Конформационный анализ» предполагается использование некоторых квантово-химических программ, предлагаемых к ознакомлению в дисциплине «Компьютерные технологии в науке и образовании», для анализа конформационных состояний (основных и переходов между ними), являющихся предметом изучения «Нанохимии». Базовые элементы «Конформационного анализа» также используются при реализации рабочих программ «Органические реагенты в современной химии», «Имитационные методы моделирование», «Симметрия кристаллических структур» и др.

3. Объем дисциплины: 3 зачетных единицы, 108 академических часов, в том числе:

контактная аудиторная работа: лекции - 15 часов, лабораторные работы - 15 часов, в т.ч. лабораторная практическая подготовка - 15 часов; **самостоятельная работа: 78 часов.**

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-1 Способен выполнять комплексные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.2 Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук
ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.2 Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:

зачет во 2-м семестре.

6. Язык преподавания русский.