

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Дата подписания: 06.06.2022 16:44:45

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Математические модели в корреляциях «структура – свойство»

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

Химия функциональных материалов

Для студентов 5 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Белоцерковец Н.И.

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины:

Математическое моделирование широко применяется в физической химии (строение вещества, термодинамика, химическая кинетика и др.). Этим определяется значение дисциплины «Математические модели в корреляциях «структура – свойство»» для студентов V курса, специализирующихся по кафедре физической химии ТвГУ. Данная дисциплина продолжает и углубляет тематику дисциплины специализации «Математические модели в физической химии». *Предмет дисциплины* составляют молекулярные математические модели в тех областях физической химии, которые связаны с исследованием взаимосвязи свойств и строения химических соединений – одним из научных направлений кафедры физической химии ТвГУ.

Цель дисциплины – дать студентам углубленное представление об основных принципах математического моделирования «структура-свойство» химических веществ.

Задачи дисциплины – научить студентов строить математические модели и применять их для решения ряда конкретных проблем молекулярного моделирования (построение расчетных схем, расчет и прогнозирование физико-химических свойств веществ).

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Математические модели в корреляциях «структура – свойство»» входит в Элективные дисциплины 8 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Данный курс расширяет и дополняет ранее изученные дисциплины «Моделирование молекулярных систем» и «Математическое моделирование».

3. Объем дисциплины: 9 зачетных единиц, 324 академических часа, в том числе:
контактная аудиторная работа: лекции **26** часов, лабораторные работы **52** часа;
контактная внеаудиторная работа: контроль самостоятельной работы **90** часов;
самостоятельная работа: **129** часов, контроль **27** часов.

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

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР ПК-1.3 Готовит объекты исследования

<p>ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы</p>	<p>ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)</p>
--	---

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:
экзамен в 9-м семестре.

6. Язык преподавания русский.