

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце: Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

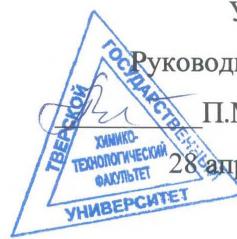
Должность: врио ректора

Дата подписания: 06.06.2022 16:44:45

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:



Руководитель ООП:

П.М. Пахомов

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)  
**Физико-химические расчеты**

Направление подготовки  
04.04.01 Химия

Направленность (профиль)  
Физическая химия

Для студентов 1 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Павлов А.С. \_\_\_\_\_

Тверь, 2021

## I. Аннотация

### 1. Цель и задачи дисциплины:

Целью освоения дисциплины является: дать магистрам углубленное изучение основных принципов феноменологической теории и показать ее плодотворность при решении задач расчета и прогнозирования физико-химических свойств веществ, необходимых для практики и не изученных экспериментально.

Задачами освоения дисциплины являются:

- научить студентов строить аддитивные схемы
- применять аддитивные схемы при расчетах и прогнозировании физико-химических свойств веществ.

### 2. Место дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина входит в Элективные дисциплины З обязательной части Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина «Физико-химические расчеты» расширяет и углубляет содержание дисциплин «Молекулярное моделирование», «Геометрия молекул и кристаллов в числах» «Молекулярная топология многоугольных фигур»,

### 3. Объем дисциплины: 4 зачетные единицы, 144 академических часа, в том числе:

**контактная аудиторная работа:** лекции - 30 часов, лабораторные работы - 30 часов, в т.ч. практическая подготовка - 30 часов;

**самостоятельная работа:** 57 часов, контроль 27 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	Семестр
ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеризации веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук;  ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук. Владеть навыком записи аддитивных	1

профессионального назначения	схем, учитывающих взаимное влияние атомов в явном виде	
ОПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	ОПК-2.1. Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук; ОПК-2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.	1

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**  
экзамен в 1-м семестре.

**6. Язык преподавания русский.**