

**АННОТАЦИЯ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ  
«Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии»**

по основной профессиональной образовательной программе по направлению подготовки  
18.04.01 «Химическая технология» (уровень магистратуры)

**Направленность (профиль):** Технология переработки пластмасс и эластомеров

**Общий объем дисциплины** – 4 з.е. (144 часов)

**Форма промежуточной аттестации** – Экзамен.

**В результате освоения дисциплины обучающийся должен обладать следующими компетенциями:**

- ОК-1: способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу;
- ОК-3: готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала;
- ОК-5: способностью к профессиональному росту, к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности;
- ОПК-3: способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки;
- ОПК-4: готовностью к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез;

**Содержание дисциплины:**

Дисциплина «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии» включает в себя следующие разделы:

**Форма обучения очная. Семестр 1.**

**1. лекция 1.** Расчёт эффективных зарядов на атомах с использованием метода теории функционала плотности (DFT).

**2. лекция 2.** Расчет термодинамических величин приближенным методом РМЗ.

**3. лекция 3.** Расчет ИК-спектров веществ с использованием метода DFT.

**4. лекция 4.** Расчет спектров ЯМР <sup>1</sup>H и с ЯМР <sup>13</sup>C использованием программ для обработки графической информации и инженерных расчётов.

**5. лекция 5.** Исследование строения органических и неорганических соединений по базам данных масс-спектров (NIST и др.).

**6. лекция 6.** Комплексный анализ строения органических и неорганических соединений по базам данных (SDBS, БД «Химия» и др.).

Разработал:

доцент

кафедры ХТ

Проверил:

Директор ИнБиоХим

А.В. Протопопов

Ю.С. Лазуткина