

**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 ¹H и с ЯМР ¹³C 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 неор-ганических соединений по базам данных (SDBS, БД «Химия» и др.)..

Разработал:

доцент

кафедры ХТ

Проверил:

Директор ИнБиоХим

А.В. Протопопов

Ю.С. Лазуткина