

Аннотация к рабочей программе дисциплины

«Молекулярное моделирование каталитических систем»

Дисциплина «Молекулярное моделирование каталитических систем» реализуется в рамках образовательной программы высшего образования – программа подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 04.06.01 Химические науки – Физическая химия по очной форме обучения на русском языке.

Место дисциплины в образовательной программе: Дисциплина «Молекулярное моделирование каталитических систем» реализуется на втором курсе в рамках вариативной части дисциплин (модулей) Блока 1 и является базовой для освоения дисциплин: «Физические методы исследования катализаторов».

Дисциплина «Молекулярное моделирование каталитических систем» направлена на формирование следующих компетенций:

Универсальные компетенции:

УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;
УК -3	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач;

Общепрофессиональные компетенции:

ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно- исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ОПК-3	готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования

Профессиональные компетенции:

ПК-1	способность использовать профильно-специализированные знания в области квантово-химических исследований элементарного акта химических превращений
ПК-2	способность использовать профильно-специализированные информационные технологии для установления механизма действия катализаторов, изучения элементарных стадий и кинетических закономерностей протекания гомогенных, гетерогенных и ферментативных каталитических превращений
ПК-3	способность проводить исследования природы каталитического действия и промежуточных соединений реагентов с катализатором с использованием химических, физических, квантово-химических и других методов
ПК-4	способность устанавливать связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции

Перечень основных разделов дисциплины:

1. Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов.
2. Принципы молекулярного моделирования

3. Источники структурной информации для молекулярного моделирования, структурные базы данных.
4. Математические методы моделирования и исследования строения и свойств химических объектов
5. Молекулярная механика, молекулярная динамика.
6. Квантово-химические методы
7. Электронный гамильтониан и полная энергия.
8. Волновая функция многоэлектронной системы.
9. Уравнения самосогласованного поля (SCF).
10. Матричная форма уравнений
11. Неограниченный метод Хартри-Фока.
12. Теория функционала плотности.
13. Расчет возбужденных состояний.
14. Структура квантово-химических программ.
15. Компоненты молекулярных конструкторов.

Общий объем дисциплины – 4 зачетных единицы (144 часа)

Правила аттестации по дисциплине. Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета. Цель итогового контроля – проверка знаний и умений, предусмотренных целями и задачами изучения дисциплины, понимания взаимосвязей различных ее разделов и связей со знаниями некоторых разделов естественнонаучных, общепрофессиональных и специальных дисциплин. Итоговый контроль проводится после освоения дисциплины в форме письменных и устных ответов на вопросы по лекционной и практической части курса. По результатам выставляется оценка «зачтено» или «не зачтено»