

Аннотация к рабочей программе дисциплины
«Молекулярное моделирование каталитических систем»

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

Место в образовательной программе: Дисциплина «Молекулярное моделирование каталитических систем» реализуется в третьем семестре в рамках вариативной части дисциплин (модулей) Блока 1.

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

ПК-7	способность использовать профильно-специализированные знания в области квантово-химических исследований элементарного акта химических превращений
ПК-8	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-9	способность экспериментально определять и рассчитывать параметры строения молекул и пространственной структуры веществ

Перечень основных разделов дисциплины:

Общие принципы дизайна (разработки) катализаторов. Принципы молекулярного моделирования. Источники структурной информации для молекулярного моделирования. Математические методы моделирования и исследования строения и свойств химических объектов. Компоненты молекулярных конструкторов.

Общий объем дисциплины – 4 зачетных единицы (144 часа)

Правила аттестации по дисциплине. Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета. Зачет проводится после освоения дисциплины в форме ответов на вопросы по лекционной и практической частям курса. По результатам аттестации выставляется оценка «зачтено» или «не зачтено». Оценка «зачтено» означает успешное прохождение промежуточной аттестации.