

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ОД.1 «Органическая химия»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.03 Органическая химия

Присуждаемая степень выпускника: кандидат химических наук.

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Разработчик рабочей программы: ИрИХ СО РАН

1. Целью изучения дисциплины является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области органической химии и в смежных областях науки; формирование обобщающей теоретической базы для изучения фундаментальных основ органической химии и возможности их использования на практике.

Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений об органической химии, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- формирование глубокого понимания общих закономерностей зависимости свойств органических соединений от их строения;
- освоение навыков теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области органической химии;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Органическая химия» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Профессиональные компетенции:

- углубленное знание теоретических и методологических основ органической химии, умение проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования наиболее актуальных проблем органической химии (ПК-1);
- способность ставить и решать инновационные задачи в области органической химии, связанные с получением органических веществ, их практическим применением, определением строения и реакционной способности с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний (ПК-2);
- владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений (ПК-3);
- умение применять физико-химические методы исследования структуры вещества, знание основ квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- методы получения, химические свойства и практическое использование основных классов органических соединений;
- типовые методы органического синтеза, используемые реагенты и оборудование;
- механизмы основных органических реакций, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность органических соединений;
- физико-химические методы исследования строения органических соединений и органических реакций;

- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных в области органической химии и методов поиска свойств и получения органических веществ;
- принципы теоретических расчетов свойств органических соединений, термодинамических и кинетических параметров органических реакций
- роль и место органической химии в системе фундаментальных химических наук и производстве современной инновационной продукции

Уметь:

- выбирать методы и реагенты синтеза органических соединений;
- планировать многостадийный органический синтез;
- проводить разделение смесей органических веществ и идентификацию состава и строения с помощью химических и физико-химических методов анализа;
- осуществлять поиск методов получения и свойств органических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;
- проводить моделирование химических реакций с использованием полуэмпирических и неэмпирических квантово-химических методов;

Иметь опыт:

- планирования и проведения органического синтеза;
- очистки органических веществ и идентификации их строения с использованием химических и физико-химических методов;
- моделирования свойств веществ и параметров органических реакций с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов и статей

3. Содержание дисциплины «Органическая химия»:

Раздел 1. Закономерности строения и реакционной способности органических соединений

1. Современные представления о природе химической связи
2. Стереохимия. Пространственное строение органических молекул. Пространственное взаимодействие несвязанных атомов и групп, ван-дер-ваальсовы радиусы
3. Классификация реакций по типу образования и разрыва связей в лимитирующей стадии, по типу реагента и по соотношению числа молекул реагентов и продуктов
4. Количественные теории кислот и оснований. Кинетическая и термодинамическая кислотность. Уравнение Бренстеда. Общий и специфический кислотно-основный катализ. Суперкислоты. Функции кислотности. Постулат Гаммета
5. Влияние среды на скорости и равновесие органических реакций
6. Основные типы интермедиатов органических реакций

Раздел 2. Основные типы органических реакций и их механизмы

7. Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду. Механизмы SN1 и SN2, смешанный ионно-парный механизм.
8. Электрофильное замещение у атома углерода
9. Реакции элиминирования
10. Реакции присоединения
11. Перегруппировки. Полимеризация, теломеризация. Электросинтез. Молекулярные и согласованные реакции. Основы фотохимии

Раздел 3. Принципы современного органического синтеза и установления строения органических соединений.

12. Выбор оптимального пути синтеза. Принцип ретросинтетического анализа. Элементоорганические соединения в органическом синтезе. Металлокомплексный катализ
13. Использование химических и физико-химических методов для установления структуры органических соединений. Принципы комбинаторной химии. Техника безопасности и экологические проблемы органического синтеза. «Зеленая химия».

Раздел 4. Основные классы органических веществ.

14. Углеводороды.
15. Спирты, эпокисды и простые эфиры
16. Карбонильные соединения.
17. Карбоновые кислоты и их производные. Углеводороды
18. Синтетическое использование реакций электрофильного замещения в ароматическом ряду
19. Методы синтеза и реакции ароматических гетероциклических соединений

4. Общая трудоёмкость изучения дисциплины: 6 зачетных единиц (216 часов).

5. Форма итогового контроля знаний: Кандидатский экзамен

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ОД.2 «Теоретические основы органической химии»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.03 Органическая химия

Присуждаемая степень выпускника: кандидат химических наук.

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Разработчик рабочей программы: ИрИХ СО РАН

1. Цели изучения дисциплины: приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области органической химии и в смежных областях науки; формирование обобщающей теоретической базы для изучения фундаментальных основ органической химии и возможности их использования на практике.

Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений об органической химии, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение теоретических основ органической химии;
- формирование глубокого понимания общих закономерностей зависимости свойств органических соединений от их строения;
- освоение навыков теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области органической химии;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов;
- освоение методики преподавания химии.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Теоретические основы органической химии» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Профессиональные компетенции

- владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений (ПК-3).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны:

Знать:

- закономерности строения, методы получения, химические свойства и основные направления практического использования основных классов органических соединений;
- типовые методы и современные методологии органического синтеза, используемые реагенты и оборудование;
- механизмы химических реакций в органической химии, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность и физико-химические свойства органических соединений;
- физико-химические методы исследования строения органических соединений и реакций органической химии;
- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных по органической химии, методы поиска информации о свойствах и синтезе органических веществ;

- принципы теоретических расчетов свойств органических соединений, термодинамических и кинетических параметров реакций в органической химии;
- роль и место органической химии в системе фундаментальных химических наук и производстве современной инновационной продукции;

Уметь:

- выбирать методы и реагенты для осуществления направленного органического синтеза;
- проводить разделение реакционных смесей, определять состав и строение продуктов реакций с помощью химических и физико-химических методов;
- осуществлять поиск методов получения и свойств элементоорганических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;
- проводить моделирование химических реакций с использованием полуэмпирических и неэмпирических квантово-химических методов;

Иметь опыт:

- планирования и проведения органического синтеза;
- очистки элементоорганических веществ и идентификации их строения с использованием химических и физико-химических методов;
- моделирования свойств веществ и параметров органических реакций с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов, статей, проектов.

3. Содержание дисциплины «Теоретические основы органической химии»:

1. Закономерности строения и реакционного поведения органических соединений.
2. Основные положения квантовой химии.
3. Классификация реакций в органической химии.
4. Теории кислот и оснований.
5. Влияние среды на скорости и равновесие органических реакций.
6. Карбениевые ионы (карбокатионы)
7. Радикальные процессы.
8. Реакции нуклеофильного замещения.
9. Электрофильные реакции в органической химии.
10. Реакции элиминирования
11. Присоединение по кратным углерод-углеродным связям
12. Нуклеофильное присоединение к карбонильной группе.
13. Перегруппировки в карбокатионных интермедиатах.
14. Молекулярные реакции.
15. Согласованные реакции.
16. Двойственная реакционная способность и таутомерия органических соединений.
17. Основы фотохимии органических соединений.

4. Общая трудоёмкость изучения дисциплины: 4 зачетные единицы (144 часа)

5. Форма итогового контроля знаний: Зачет с оценкой.

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ОД.3 «Физико-химические методы исследования структуры веществ»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.03 Органическая химия

Присуждаемая степень выпускника: кандидат химических наук.

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Разработчик рабочей программы: ИрИХ СО РАН

1. Целью изучения дисциплины является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области применения физико-химических методов исследования и в смежных областях науки. Формирование компетенций в области основных физико-химических методов установления состава и строения органических соединений, формирование навыков самостоятельной работы с приборной и аналитической базой физико-химических методов анализа, компьютерным парком и он-лайн базами данных.

Задачи дисциплины:

- формирование представлений об физико-химических методах изучения структуры веществ;
- ознакомление с основами важнейших современных физико-химических методов анализа;
- формирование навыков и умений получения и интерпретации данных физико-химических методов анализа (УФ, ИК- ЯМР, масс-), установления строения органических и элементоорганических соединений по совокупности данных инструментальных методов.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Физико-химические методы исследования структуры веществ» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Профессиональные компетенции:

- умение применять физико-химические методы исследования структуры вещества, знание основ квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны:

Знать:

- теоретические и методологические основы физико-химических методов изучения структуры веществ;
- принципы, условия и методологию применения физико-химических методов на практике;
- возможности тех или иных физико-химических методов в установлении структуры органических и элементоорганических соединений;

Уметь:

- выбирать необходимые и оптимальные методы для установления структуры органических и элементоорганических соединений;
- проводить разделение смесей органических или элементоорганических веществ, идентификацию их состава и определять строение с помощью химических и физико-химических методов анализа;
- осуществлять поиск методов идентификации и информации о структурных параметрах органических и элементоорганических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;

Иметь опыт:

- работы на современном научном оборудовании для физико-химических исследований органических и элементоорганических соединений;
- моделирования структурных параметров органических и элементоорганических веществ с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов и статей.

3. Содержание дисциплины «Физико-химические методы исследования структуры веществ»:

1. Общая характеристика и классификация физико-химических методов определения структуры веществ.
2. Масс-спектрометрия.
3. Спектроскопические методы исследования.
4. Методы колебательной спектроскопии: инфракрасные спектры и комбинационное рассеяние света.
5. Электронная спектроскопия. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях.
6. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция).
7. Рентгеновские методы исследования.
8. Методы исследования оптически активных веществ.
9. Резонансные методы.

4. Общая трудоёмкость изучения дисциплины: 3 зачетные единицы (108 часов).

5. Форма итогового контроля знаний: Зачет.

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ОД.4 «Основы стереохимии»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.03 Органическая химия

Присуждаемая степень выпускника: кандидат химических наук.

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Разработчик рабочей программы: ИрИХ СО РАН

1. Цель дисциплины – подготовка специалистов-химиков, обладающих углубленными знаниями в области стереохимии органических соединений и пространственного строения органических молекул, способных работать в соответствующих областях органической химии и в смежных разделах науки и высшего образования.

Задачи дисциплины:

- усвоение теоретических представлений о пространственном строении органических молекул;
- установление взаимосвязи между пространственным строением молекул и их реакционной способностью, физическими свойствами и биологической активностью;
- освоение методов проведения стереоселективных реакций.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Основы стереохимии» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Профессиональные компетенции:

- владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмов органических реакций, стереохимии, химии (ПК-3).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- основные и углубленные положения стереохимии (хиральность, конфигурация и конформация), стереохимическую номенклатуру, номенклатуру конформеров, диастереомеров и энантиомеров;
- методы получения стереоизомеров и определение их пространственной конфигурации;
- стереохимию алканов, циклоалканов, соединений с кратными углерод-углеродными связями, стереохимию соединений азота, фосфора, серы, стереохимию протекания реакций радикального, нуклеофильного и электрофильного замещения у насыщенного и ненасыщенного атома углерода, реакций моно- и бимолекулярного элиминирования и присоединения по связям углерод-углерод и углерод-гетероатом;
- особенности пространственного строения органических соединений различных классов в зависимости от специфичности их электронного строения и природы заместителей, входящих в их состав;
- влияние строения на реакционную способность органических соединений;
- физико-химические методы исследования строения оптически активных веществ и стереоизомеров;
- терминологию и правила построения химических названий органических соединений по номенклатуре IUPAC;
- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных в области органической стереохимии и методы поиска литературных данных по свойствам и получению оптически активных веществ;
- роль и место органической стереохимии в системе фундаментальных химических наук и производстве современной инновационной продукции.

Уметь:

- выбирать методы и реагенты для осуществления направленных стереохимических превращений;
- проводить разделение смесей стереоизомеров и идентификацию их состава и строения с помощью химических и физико-химических методов анализа;
- представлять изомеры с помощью проекционных формул Ньюмена и Фишера, пользоваться этими формулами, определять конфигурацию асимметрического центра;
- составлять формулы по названию органических соединений и составлять названия по формулам;
- осуществлять поиск методов получения и свойств оптически активных соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;

Иметь опыт:

- планирования и проведения экспериментов в области органической стереохимии;
- выделения в индивидуальном виде индивидуальных стереоизомеров (диастереомеров, энантиомеров) и идентификации их строения с использованием химических и физико-химических методов;
- написания научных отчетов и статей.

3. Содержание дисциплины «Основы стереохимии»:

1. Основные положения стереохимии.
2. Стереоизомеры.
3. Конфигурация.
4. Гетеротопные заместители и стороны, простереоизомерия и прохиральность.
5. Стереохимия алкенов.
6. Конформации ациклических молекул.
7. Конфигурация и конформация циклических молекул.
8. Хирооптические свойства.
9. Хиральность молекул, не имеющих хиральных центров.
10. Стереохимия тетраэдрических элементов.

4. Общая трудоёмкость изучения дисциплины: 3 зачетные единицы (108 часов).

5. Форма итогового контроля знаний: Зачет.

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ДВ.1.1 «Химия элементоорганических соединений»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.03 Органическая химия

Присуждаемая степень выпускника: кандидат химических наук.

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Разработчик рабочей программы: ИрИХ СО РАН

1. **Целью** изучения дисциплины является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области химии элементоорганических соединений; формирование обобщающей теоретической базы для изучения фундаментальных основ химии элементоорганических соединений и возможности их использования на практике.

Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений о химии элементоорганических соединений, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение навыков теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области химии;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Химия элементоорганических соединений» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Профессиональные компетенции:

- владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений (ПК-3).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- методы получения, химические свойства и практическое использование основных классов элементоорганических соединений;
- типовые методы элементоорганического синтеза, используемые реагенты и оборудование;
- механизмы основных реакций, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность элементоорганических соединений;
- физико-химические методы исследования строения элементоорганических соединений и элементоорганических реакций;
- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных в области химии элементоорганических соединений и методов поиска свойств и получения элементоорганических веществ;
- принципы теоретических расчетов свойств элементоорганических соединений, термодинамических и кинетических параметров элементоорганических реакций
- роль и место химии элементоорганических соединений в системе фундаментальных химических наук и производстве современной инновационной продукции.

Уметь:

- выбирать методы и реагенты синтеза элементоорганических соединений;
- проводить разделение смесей элементоорганических веществ и идентификацию состава и строения с помощью химических и физико-химических методов анализа;
- осуществлять поиск методов получения и свойств элементоорганических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;
- проводить моделирование химических реакций с использованием полуэмпирических и неэмпирических квантово-химических методов;

Иметь опыт:

- планирования и проведения синтеза элементоорганических соединений;
- очистки элементоорганических веществ и идентификации их строения с использованием химических и физико-химических методов;
- моделирования свойств веществ и параметров элементоорганических реакций с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов и статей

3. Содержание дисциплины «Химия элементоорганических соединений»:

1. Теоретические представления о природе химических связей и электронном строении элементоорганических соединений.
2. Реакционная способность элементоорганических соединений.
3. Физические методы исследования структуры и электронного строения ЭОС.
4. Органические производные непереходных элементов.
5. Органические производные переходных металлов.

4. Общая трудоёмкость изучения дисциплины: 2 зачетные единицы (72 часа).

5. Форма итогового контроля знаний: Зачет.

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ДВ.1.2 **«Механизмы органических реакций»**

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.03 Органическая химия

Присуждаемая степень выпускника: кандидат химических наук.

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Разработчик рабочей программы: ИрИХ СО РАН

1. **Целью** изучения дисциплины аспирантами является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков в области органической химии, приобретение знаний, необходимых для решения задач, связанных с органической химией, способных к инновационной деятельности в соответствующей области органической химии и в смежных областях науки и высшего образования.

Задачи дисциплины:

- формирование представлений о механизмах органических реакций;
- ознакомление с типами реакций и классификацией реагентов.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Механизмы органических реакций» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Профессиональные компетенции:

- владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений (ПК-3);

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- методы получения, химические свойства и практическое использование основных классов органических соединений;
- типовые методы органического синтеза, используемые реагенты и оборудование;
- механизмы основных органических реакций, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность органических соединений;
- физико-химические методы исследования строения органических соединений и органических реакций;

Уметь:

- выбирать методы и реагенты синтеза органических соединений;
- планировать многостадийный органический синтез;
- проводить разделение смесей органических веществ и идентификацию состава и строения с помощью химических и физико-химических методов анализа;
- осуществлять поиск методов получения и свойств органических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;
- проводить моделирование химических реакций с использованием полуэмпирических и неэмпирических квантово-химических методов;

Иметь опыт:

- планирования и проведения экспериментов органического синтеза;
- очистки органических веществ и идентификации их строения с использованием химических и физико-химических методов;
- написания научных отчетов и статей

3. Содержание дисциплины «Механизмы органических реакций»:

1. Структура и реакционная способность.
2. Электронные эффекты в органических молекулах.
3. Типы реакций и классификация реагентов.
4. Кинетика и термодинамика органических реакций.
5. Характеристика интермедиатов реакций.
6. Цепные радикальные реакции.
7. Нуклеофильное замещение у насыщенного атома углерода.
8. Реакции элиминирования.
9. Электрофильное и нуклеофильное замещение в ароматическом ряду
10. Реакции электрофильного присоединения к кратным углерод-углеродным связям.
11. Реакции нуклеофильного присоединения к кратным связям.

4. Общая трудоёмкость изучения дисциплины: 2 зачетные единицы (72 часа).

5. Форма итогового контроля знаний: Зачет.

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ДВ.2.1 «Химия высокомолекулярных соединений»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.03 Органическая химия

Присуждаемая степень выпускника: кандидат химических наук.

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Разработчик рабочей программы: ИрИХ СО РАН

1. Целью изучения дисциплины является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской, инновационной и образовательной деятельности в области химии высокомолекулярных соединений; формирование обобщающей теоретической базы для изучения фундаментальных основ химии высокомолекулярных соединений и возможности их использования на практике.

Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений о химии высокомолекулярных соединений, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение навыков теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области химии;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Химия высокомолекулярных соединений» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Профессиональные компетенции:

- владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии (ПК-3);

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- методы получения, химические свойства и практическое использование основных классов высокомолекулярных соединений;
- типовые методы синтеза полимеров, используемые реагенты и оборудование;
- механизмы основных полимеризационных процессов, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность высокомолекулярных соединений;
- физико-химические методы исследования строения высокомолекулярных соединений и полимеризационных процессов;
- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных в области химии высокомолекулярных соединений и методов поиска свойств и получения полимеров;
- роль и место химии высокомолекулярных соединений в системе фундаментальных химических наук и производстве современной инновационной продукции

Уметь:

- выбирать методы и реагенты синтеза мономеров и полимеров;
- планировать полимеризационный процесс;
- проводить разделение смесей полученных высокомолекулярных соединений и идентификацию состава и строения с помощью химических и физико-химических методов анализа;

- осуществлять поиск методов получения и свойств высокомолекулярных соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;

Иметь опыт:

- планирования и проведения синтеза высокомолекулярных соединений;
- очистки полимеров и идентификации их строения с использованием химических и физико-химических методов;
- моделирования свойств веществ и параметров реакций с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов и статей

3. Содержание дисциплины «Химия высокомолекулярных соединений»:

Раздел 1. Классификация и номенклатура полимеров

1. Классификация полимеров.
2. Номенклатура полимеров.

Раздел 2. Синтез полимеров

3. Полимеризация.
4. Поликонденсация.

Раздел 3. Химические реакции полимеров

5. Реакции без изменения степени полимеризации.
6. Реакции, приводящие к изменению степени полимеризации.

Раздел 4. Макромолекулы и их поведение в растворах

7. Конфигурации и конфигурационная изомерия макромолекулы.
8. Конформационная изомерия и конформация макромолекулы.
9. Макромолекулы в растворах.

Раздел 5. Полимерные тела.

10. Структура и основные физические свойства полимерных тел.
11. Свойства аморфных полимеров.

Раздел 6. Нанополимеры.

12. Свойства нанополимеров
13. Получение наноматериалов
14. Применение нанополимеров.

Раздел 7. Полимерные материалы и изделия.

15. Пластические массы
16. Эластомеры
17. Пленки
18. Волокна
19. Растворы полимеров

4. Общая трудоёмкость изучения дисциплины: 1 зачетная единица (36 часов).

5. Форма итогового контроля знаний: Зачет.

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ДВ.2.2 «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.03 Органическая химия

Присуждаемая степень выпускника: кандидат химических наук.

Квалификация: Исследователь. Преподаватель-исследователь.

Разработчик рабочей программы: ИрИХ СО РАН

1. Цели изучения дисциплины: приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской и образовательной деятельности в области квантовой химии и в смежных областях науки; формирование обобщающей теоретической базы для изучения строения и реакционной способности веществ методами квантовой химии.

Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений о квантовой химии, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение теоретических основ квантовой химии;
- формирование глубокого понимания общих закономерностей зависимости свойств соединений от их строения;
- освоение навыков применения методов моделирования электронного строения атомов и молекул для решения научных и прикладных задач химии;
- формирование представлений о квантово-химической теории реакционной способности соединений и получение навыков ее использования для решения научных и прикладных задач;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов;
- освоение методики преподавания химии.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки:

Профессиональные компетенции

- умение применять физико-химические методы исследования структуры вещества, знание основ квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны:

Знать:

- типовые методы и современные методологии решения квантово-химических задач;
- методы изучения электронного строения атомов и молекул;
- основы квантово-химической теории реакционной способности соединений;
- механизмы базовых химических реакций в органической и элементоорганической химии, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность и физико-химические свойства органических соединений;
- физико-химические методы исследования строения органических соединений и реакций органической химии;

- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных по органической химии, методы поиска информации о свойствах и синтезе органических веществ;
- роль и место квантовой химии в системе фундаментальных химических наук;

Уметь:

- оценивать и анализировать электронное строение атомов и молекул;
- осуществлять расчеты электронного строения атомов и молекул, интерпретировать полученные результаты;
- оценивать реакционную способность органических и элементоорганических соединений с помощью методов квантовой химии;
- осуществлять поиск литературных данных по теме исследования с использованием современных баз данных и поисковых систем;

Иметь опыт:

- планирования и проведения эксперимента по теме научного исследования;
- применения квантово-химических расчетов электронного строения атомов и молекул;
- моделирования свойств веществ и параметров органических реакций с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов, статей, проектов.

3. Содержание дисциплины «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ»:

1. Основы современной теории химического строения.
2. Методы квантовой химии.
3. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.
4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.
5. Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО.
6. Теория реакционной способности органических соединений.

4. Общая трудоёмкость изучения дисциплины: 1 зачетная единица (36 часов).

5. Форма итогового контроля знаний: Зачет.