

## Аннотация рабочей программы

**Дисциплина:** Б1.В.ОД.1 «Физическая химия»

**Отрасль науки:** 04.06.01 Химические науки

**Профили:** 02.00.04 Физическая 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 физической химии; формирование обобщающей теоретической базы для изучения фундаментальных основ физической химии и возможности их использования на практике.

### **Задачи:**

- формирование у обучающихся современных представлений о физической химии, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение навыков теоретического анализа результатов экспериментальных исследований в области физической 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 использовать в работе программно-аппаратные средства для изучения физико-химических процессов;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов.

### **2. Результаты освоения дисциплины:**

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

#### ***Универсальные компетенции***

- 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-1);
- способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);
- способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

#### ***Общепрофессиональные компетенции***

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);
- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

### **Профессиональные компетенции:**

- углубленное знание теоретических и методологических основ физической химии, умение проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования наиболее актуальных проблем физической химии (ПК-1);
- способность ставить и решать инновационные задачи, связанные с разработкой новых химических технологий, изучением свойств веществ с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний, аналитических методов и сложных моделей в условиях неопределенности, умение работать с аппаратурой, выполненной на базе микропроцессорной техники и персональных компьютеров для решения практических задач физической химии (ПК-2);
- умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике 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:**

- современные достижения науки и передовые технологии в области физической химии;
- современные методы исследования, используемые при физико-химических исследованиях;
- теоретические представления химии, в том числе о строении и механизмов химических реакций;
- важнейшие методы квантовой химии
- фундаментальные основы и методы дизайна и синтеза химических соединений и материалов, в том числе и с заранее заданными свойствами;
- методы исследования структуры и функционально важных свойств химических соединений.

#### **Уметь:**

- оценивать перспективные направления развития физической химии с учетом мирового опыта;
- анализировать взаимосвязь между составом, строением и свойствами соединений, в том числе, наноструктурированных материалов;
- применять современные методы и средства исследования для решения конкретных задач физической химии;
- прогнозировать и использовать реакционную способность химических веществ в различных агрегатных состояниях и экстремальных условиях;

#### **Иметь опыт:**

- планирования процессов решения задач физической химии;
- анализировать возможность создания новых технологий на базе проведенных исследований;
- работы с программно-аппаратными средствами для изучения физико-химических процессов.

### **3. Содержание дисциплины «Физическая химия»:**

#### **Раздел 1. Строение вещества**

1. Квантово-химический расчет молекул.
2. Оценка реакционной способности молекул.
3. Оценка термодинамических параметров химических реакций.

#### **Раздел 2. Термодинамика и кинетика процессов сорбции**

4. Уравнения мономолекулярной адсорбции.
5. Уравнение Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.
6. Сорбция на пористых сорбентах.

7. Кинетика сорбции. Уравнение Рогинского-Зельдовича. Уравнения для скорости адсорбции и десорбции Бэнхема–Барта, Квана.

### **Раздел 3. Теория растворов**

8. Парциальные молярные величины. Методы определения парциальных молярных величин Термодинамические типы растворов.
9. Функция смешения для различных типов растворов
10. Уравнения, описывающие термодинамические функции смешения компонентов в рамках различных моделей.

### **Раздел 4. Фазовые равновесия**

11. Фазовые диаграммы бинарных систем.
12. Оценка фазового состава наноструктурированных бинарных сплавов.

### **Раздел 5. Кинетика химических реакций**

13. Формальная кинетика химических реакций.
14. Кинетика диффузионных процессов.
15. Кинетика необратимых электродных процессов.
16. Критерии обратимости электродных процессов.
17. Кинетика каталитических процессов. Ферментативный катализ.
18. Основные промышленные каталитические процессы.
19. Тематика практических занятий.

**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 «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ»

**Отрасль науки:** 04.06.01 Химические науки

**Профили:** 02.00.04 Физическая 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 «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:** 3 зачетные единицы (108 часов)

**5. Форма итогового контроля знаний:** Зачет.

## Аннотация рабочей программы

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

**Отрасль науки:** 04.06.01 Химические науки

**Профили:** 02.00.04 Физическая 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 «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).

#### **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:** 4 зачетные единицы (144 часа).

**5. Форма итогового контроля знаний:** Зачет.

## Аннотация рабочей программы

**Дисциплина:** Б1.В.ОД.4 «Механизмы органических реакций»

**Отрасль науки:** 04.06.01 Химические науки

**Профили:** 02.00.04 Физическая 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:**

- умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике; 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:** 3 зачетные единицы (108 часов).

**5. Форма итогового контроля знаний:** Зачет.

## Аннотация рабочей программы

**Дисциплина:** Б1.В.ДВ.1.1 «Органическая химия»

**Отрасль науки:** 04.06.01 Химические науки

**Профили:** 02.00.04 Физическая 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:**

- умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных (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;
- 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, эпоксиды 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:** 2 зачетные единицы (72 часа).

**5. Форма итогового контроля знаний:** Зачет.

## Аннотация рабочей программы

**Дисциплина:** Б1.В.ДВ.1.2 **«Теоретические основы органической химии»**

**Отрасль науки:** 04.06.01 Химические науки

**Профили:** 02.00.04 Физическая 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**

- умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике; 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:** 2 зачетные единицы (72 часа).

**5. Форма итогового контроля знаний:** Зачет.

## Аннотация рабочей программы

**Дисциплина:** Б1.В.ДВ.2.1 «Химия элементоорганических соединений»

**Отрасль науки:** 04.06.01 Химические науки

**Профили:** 02.00.04 Физическая 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 химии элементоорганических соединений, приобретение знаний, необходимых для решения задач, связанных с химией элементоорганических соединений, способных к инновационной деятельности в соответствующей области химии элементоорганических соединений и в смежных областях науки и высшего образования.

### 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:**

- умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике, 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:** 1 зачетная единица (36 часов).

**5. Форма итогового контроля знаний:** Зачет.

## Аннотация рабочей программы

**Дисциплина:** Б1.В.ДВ.2.2 «Основы стереохимии»

**Отрасль науки:** 04.06.01 Химические науки

**Профили:** 02.00.04 Физическая 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:**

- умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике; 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:**

- 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:** 1 зачетная единица (36 часов).

**5. Форма итогового контроля знаний:** Зачет.