

Аннотация рабочей программы

Дисциплина: Б1.В.ОД.1 «Химия элементоорганических соединений»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки.

Профили: 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

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 «Химия элементоорганических соединений» 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 химии элементоорганических соединений, умение работать с аппаратурой и приборами, предназначенными для исследований элементоорганических веществ (ПК-1);
- способность ставить и решать инновационные задачи в области химии элементоорганических соединений, связанные с получением элементоорганических веществ, их практическим применением, определением строения и реакционной способности с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний (ПК-2);
- умение проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель 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, органической химии (ПК-3);
- умение применять физико-химические методы исследования структуры для изучения структуры элементоорганических соединений, 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 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: 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: 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

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

- умением проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования (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: 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

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 для изучения структуры элементоорганических соединений, основы 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: 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

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 и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель 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, органической 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 «Органическая химия»

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

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 «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 и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель 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, органической химии (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»:

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-основной 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 **«Механизмы органических реакций»**

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

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 и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение (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 **«Применение спектроскопии ЯМР для изучения структуры элементоорганических соединений»**

Отрасль науки: 04.06.01 Химические науки

Профили: 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

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 и образовательной деятельности в области химии элементоорганических соединений и в смежных областях науки, формирование компетенций в области физико-химических методов установления состава и строения элементоорганических 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 изучении структуры элементоорганических соединений методом ЯМР спектроскопии;
- ознакомление с основами важнейших современных методик ЯМР спектроскопии и их приложениями по изучению структуры;
- формирование навыков и умений получения и интерпретации ЯМР спектроскопии для установления строения элементоорганических соединений в совокупности с другими физико-химическими методами.

2. Результаты освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины «Применение ЯМР-спектроскопии для изучения структуры элементоорганических соединений» 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 для изучения структуры элементоорганических соединений, основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4);

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

Знать:

- теоретические и методологические основы метода ЯМР-спектроскопии;
- принципы, условия и методологию применения метода ЯМР-спектроскопии;
- возможности метода ЯМР-спектроскопии в установлении структуры элементоорганических соединений;

Уметь:

- выбирать необходимые и оптимальные методики в рамках метода ЯМР-спектроскопии для установления структуры элементоорганических соединений;
- проводить идентификацию элементоорганических веществ и определять их строение по данным ЯМР-спектроскопии;
- осуществлять поиск информации о структурных параметрах элементоорганических соединений с использованием современных баз данных и поисковых систем;

Иметь опыт:

- интерпретации данных, полученных с помощью ЯМР-спектроскопии, для исследований структуры элементоорганических соединений;
- моделирования спектральных и структурных параметров элементоорганических веществ с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов и статей

3. Содержание дисциплины «Применение спектроскопии ЯМР для изучения структуры элементоорганических соединений»:

1. Основы спектроскопии ЯМР и спектроскопия ЯМР ^1H .
2. Современные методы ЯМР спектроскопии.
3. ЯМР на ядрах, отличных от протонов.
4. Особенности спектроскопии ЯМР фторорганических соединений.
5. Особенности спектроскопии ЯМР фосфорорганических соединений.
6. Особенности спектроскопии ЯМР кремнийорганических соединений.
7. Особенности спектроскопии ЯМР халькогенорганических соединений.
8. Особенности спектроскопии ЯМР металлоорганических соединений.

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: 02.00.08 Химия элементоорганических соединений.

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 для изучения структуры элементоорганических соединений, основы 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.