

Аннотации рабочих программ дисциплин по направлению подготовки 04.06.01–Химические науки (направленность – физическая химия)

Б1.Б Базовая часть

Б.1.Б.1 История и философия науки

Настоящая программа философской части кандидатского экзамена по курсу "История и философия науки" предназначена для аспирантов и соискателей всех научных специальностей. Она представляет собой введение в общую проблематику философии науки. Наука рассматривается в широком социокультурном контексте и в ее историческом развитии. Особое внимание уделяется проблемам кризиса современной техногенной цивилизации и глобальным тенденциям смены научной картины мира, типов научной рациональности, системам ценностей, на которые ориентируются ученые. Программа ориентирована на анализ основных мировоззренческих и методологических проблем, возникающих в науке на современном этапе ее развития и получение представления о тенденциях исторического развития науки.

Коды формируемых компетенций: процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

- универсальные компетенции (УК): УК-2, УК-5
- общепрофессиональные компетенции (ОПК): ОПК-1

Общая трудоемкость дисциплины: 4 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации: кандидатский экзамен.

Б.1.Б.2 Иностранный язык

Цель дисциплины: достижение практического владения иностранным языком, позволяющего использовать его в научной работе; подготовка к сдаче кандидатского минимума по иностранному языку.

Задачи дисциплины: практическое владение иностранным языком в рамках данного курса предполагает формирование и развитие таких навыков и умений в различных видах речевой коммуникации, которые дают возможность: - свободно читать оригинальную научную литературу на иностранном языке; - оформлять извлеченную из иностранных источников информацию в виде перевода или резюме; - делать сообщения и доклады на иностранном языке на темы, связанные с научной работой аспиранта (экстерна); - вести беседу по специальности на иностранном языке.

Коды формируемых компетенций: процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

- универсальные компетенции (УК): УК-3, УК-4
- общепрофессиональные компетенции (ОПК): ОПК-2

Общая трудоемкость дисциплины: 5 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации: кандидатский экзамен

Б1.В Вариативная часть

Б1.В.ОД Обязательные дисциплины

Б 1.В.ОД.1. Избранные главы квантовой химии

Целью настоящего курса является ознакомление аспирантов с популярными расчетными методами современной квантовой химии, включающими наиболее точные методы расчета электронной и геометрической структуры молекул, которые используются для получения важной и труднодоступной для эксперимента информации.

- Физические равновесия в растворах.
- Химическое равновесие.
- Эмпирическая и формальная кинетика.
- Элементарная теория одностадийных реакций.
- Кинетика сложных химических реакций.

Коды формируемых компетенций: процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

универсальные компетенции (УК): УК-1, УК-4 УК-5.

общепрофессиональные компетенции (ОПК): ОПК-1, ОПК-2,

профессиональные компетенции (ПК): ПК-1

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации: экзамен

Б1.В.ОД.3 Современные физические методы исследования материалов

Цель дисциплины

- подготовка квалифицированных научных кадров в области химии и физики, способных вести научно-исследовательскую работу, самостоятельно ставить и решать актуальные научные и практические задачи.

Задачи дисциплины включают

- формирование у аспирантов системы знаний и основных понятий по современным методам исследования, позволяющим развивать способности к научно-исследовательской работе и навыков самостоятельного ведения экспериментальных исследований.

Краткое содержание дисциплины:

Спектроскопические методы, а также методы, основанные на разделении компонент, электрохимические, рентгеноструктурные и другие. Принципы, требования к образцам, получаемая информация, распространенность методов и доступность в Черноголовке и ИПХФ РАН. Основы магнитного резонанса. ЭПР спектроскопия (Основы теории спектров ЭПР, Метод спиновых меток. Двойной электрон-электронный и двойной электрон-ядерный резонансы) Ямр спектроскопия (Двумерная и многомерная Фурье спектроскопия, Спектры магнитного резонанса в жидкостях, ЯМР в твердых телах. Исследование процессов самодиффузии методами импульсного ЯМР) Оптическая спектроскопия (Связь параметров с молекулярными характеристиками, Спектры поглощения молекул с сопряженными связями, зависимость от длины цепи сопряжения. Спектры молекулярных ионов. Комплексы с переносом заряда. Электропроводящие соединения Флуоресценция и фосфоресценция Спектральные приборы. Дисперсионные и Фурье спектрометры. Индуцированная эмиссия электронов (,Основы метода Оже-спектроскопии, Исследования углеродных наноструктур методами электронной спектроскопии) Электронная микроскопия (Просвечивающая электронная микроскопия. Туннельная и атомно-силовая микроскопия. Растровая электронная микроскопия), Рентгеновские методы исследования (Рентгеноструктурный анализ, Устройство монокристалльных дифрактометров) Магнитные состояния твердых тел (Обзор физических и экономических характеристик магнитов, Магнитная анизотропия, Экспериментальные методы аттестации магнитов, Классификация магнитных состояний твердых тел)

Коды формируемых компетенций: процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

Раздел 1. Особенности кинетики химических процессов в конденсированной фазе (Введение в курс «Кинетика реакций в конденсированной фазе». Особенности жидкого состояния вещества. Диффузия, кинетика реакций, контролируемых диффузией. Клеточный эффект и его экспериментальное проявление. Бимолекулярные реакции в жидкой фазе. Теория столкновений, теория активированного комплекса. Влияние давления на скорость реакции)

Раздел 2. Кинетика жидкофазных реакций с участием реагентов разной природы (Кинетика жидкофазных реакций с участием ионов, полярных молекул, молекулярных комплексов и переноса электрона. Радикальные реакции. Реакции молекул. Корреляционные уравнения в кинетике жидкофазных реакций)

Коды формируемых компетенций: процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

универсальные компетенции (УК): УК-1, УК-3, УК-5

общефессиональные компетенции (ОПК): ОПК-1

профессиональные компетенции (ПК): ПК-1, ПК-4

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации: зачет

Б 1.В.ОД.6 Реакционная способность молекул

Целью изучения настоящей дисциплины является подготовка квалифицированных научных кадров в области физической химии, вооружение их необходимыми теоретическими знаниями для научно-исследовательской работы, усиливающих их способность к самостоятельной постановке и решению актуальных научных и практических задач.

Задачи дисциплины:

- формирование у аспирантов базовых знаний и основных понятий в области прикладной теоретической химии, как дисциплины, интегрирующей знания в области квантовой химии, гомогенного и ферментативного катализа и химии комплексных соединений для решения комплексных задач по управлению скоростями химических реакций.

- обучение навыкам теоретического анализа структурных, термодинамических, орбитальных и спиновых факторов, определяющих эффективность взаимодействия молекул, приводящего к их химической трансформации

- формирование подходов к выполнению исследований, основанных на молекулярных представлениях.

- развитие способности к научно-исследовательской работе и выработку потребности к самостоятельному приобретению знаний по химии

Краткое содержание дисциплины:

Введение в реакционную способность молекул. Основы вычислительной химии.

Квантово-химические подходы к изучению реакционной способности. Спиновые запреты в химии. Межмолекулярные взаимодействия. Реакции электронного переноса. Корреляционные соотношения для реакционной способности. Современная концепция единства гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа. Общая характеристика особенности электронной структуры соединений переходных металлов, обуславливающих их высокую каталитическую активность. Редокс катализ. Супрамолекулярный катализ.

Коды формируемых компетенций: процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

универсальные компетенции (УК): УК-1, УК-4, УК-5

общефессиональные компетенции (ОПК): ОПК-1, ОПК-2

профессиональные компетенции (ПК): ПК-1, ПК-4

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы.

- 5 Учебно-методический комплекс дисциплины
- 6 Место и роль самостоятельной работы студента в высшей школе
- 7 Организация и проведение практик
- 8 Методика руководства учебно-исследовательской работой студента.
- 9 Проблема модернизации образования

Коды формируемых компетенций: процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки:

универсальные компетенции (УК): УК-5,

обще профессиональные компетенции (ОПК): ОПК-3

Общая трудоемкость дисциплины: 1 зачетная единица.

Форма промежуточной аттестации: зачет

Б.1.В.ДВ Элективные дисциплины (по выбору)

Б.1.В.ДВ.1 Современные химические технологии на основе исследований в области химической физики

Цель дисциплины: приобретение фундаментальных знаний и практических навыков в области химической физики и использование их как теоретического фундамента для разработки современных промышленных химических процессов и производств, показать взаимосвязь фундаментальных научных исследований в области химической физики с основами создания масштабных химических производств.

Задачи: привить учащимся навыки систематического подхода к решению химических и технологических задач фундаментального и прикладного характера.

Краткое содержание дисциплины:

Краткие сведения по термодинамике и химической кинетике технологических процессов. Научные основы и механизмы каталитических процессов в нефте- и газохимии. Сырьевая и энергетическая базы нефтехимической и газохимической промышленности. Базовые продукты нефте- и газохимии. Основные промышленные технологии их получения. Особенности функционирования промышленных катализаторов. Современные каталитические химико-технологические процессы. Научные основы новых технологических методов химической переработки попутных нефтяных газов в ценные химические продукты. Мембранно-каталитические процессы переработки газового сырья. Разработка современных процессов гидрирования органических соединений. Классификация и свойства основных промышленных полимерных продуктов. Процессы статистической, селективной олигомеризации и регулируемой полимеризации этилена и других олефинов. Введение в макрокинетику химико-технологических процессов. Разработка современных химико-технологических процессов с использованием сверхкритических флюидов. Научные основы метода фильтрационного горения. Конъюнктурные и маркетинговые исследования инновационных коммерчески ориентированных процессов нефтегазохимической отрасли. Определение основных технико-экономических показателей газо- и нефтехимических процессов, готовых к промышленной реализации. Особенности перехода работ от стадии фундаментальных исследований к решению задач прикладного характера для разрабатываемых процессов.

Коды формируемых компетенций: процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ООП ВО по данному направлению подготовки: -

универсальные компетенции (УК): УК-3, УК-5, УК-1

обще профессиональные компетенции (ОПК): ОПК-1, ОПК-2

профессиональные компетенции (ПК): ПК-1, ПК-3, ПК-5

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации: зачет