

**Аннотации рабочих программ дисциплин по направлению подготовки
04.06.01 –Химические науки,
направленность (профиль) «Физическая химия»**

Базовая часть

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. Программа включает введение в общие вопросы философии науки. Наука рассматривается в широком социокультурном контексте в процессе исторического развития. Особое внимание уделено проблемам кризиса современной техногенной цивилизации и глобальным тенденциям научной картины мира, типам научной рациональности и системам ценностей, на которые ориентируются ученые. Проанализированы основные мировоззренческие и методологические аспекты, возникающие в науке на современном этапе, а также тенденции ее исторического развития.

В результате освоения дисциплины «История философии и науки» обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях, современные философские проблемы областей научного знания; общие проблемы философии науки; информационную концепцию научного процесса.

Уметь: методологически грамотно осмысливать конкретно-научные проблемы с видением их в мировоззренческом контексте истории науки; критически воспринимать новые научные факты и гипотезы.

Владеть: широким спектром междисциплинарного научного инструментария, применяемого в современной науке, культурой научного исследования, навыками анализа основных мировоззренческих и методологических проблем, в том числе междисциплинарного характера, возникающих в науке на современном этапе ее развития, технологиями планирования профессиональной деятельности в сфере научных исследований.

Общая трудоемкость дисциплины: 4 зачетные единицы (144ч)

Форма аттестации: кандидатский экзамен

Формируемые компетенции: УК-1, УК-2, УК-5, ОПК-1.

2. Иностранный язык

Цели 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.

В результате освоения дисциплины «Иностранный язык» обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

знать: терминологию делового иностранного языка, особенности представления результатов научной деятельности в письменной форме при работе в российских и международных исследовательских коллективах.

Уметь: применять знания иностранного языка при проведении рабочих переговоров и составлении условных документов, следовать основным нормам, принятым в научном общении на государственном и иностранном языках.

Владеть навыками общения на иностранном языке.

Общая трудоемкость дисциплины: 5 зачетных единиц (180 ч)

Форма аттестации: кандидатский экзамен

Формируемые компетенции: УК-3, УК-4, УК-5, ОПК-2.

Вариативная часть

Обязательные дисциплины

3. 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.

Задачей курса являются усвоение на практике базового метода квантовой химии – метода молекулярных орбиталей и методов учета энергии электронной корреляции. Важной задачей курса является выработка у аспирантов отношения к получаемым квантово-химическим результатам, как к машинному эксперименту, равноправному по отношению к любым физико-химическим методам исследования, умение сравнивать достоверность результатов расчетов, выполненных в различных приближениях другими авторами.

Краткое содержание дисциплины:

Введение в курс «Квантовая химия» и возможности современной квантовой химии.

Приближение Борна-Оппенгеймера. Вариационный метод и вариационный принцип. Одноэлектронное приближение. Волновая функция многоэлектронной системы в одноэлектронном приближении. Средняя энергия в одноэлектронном приближении. Уравнения Хартри и Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока для замкнутых оболочек. Линейный вариационный метод. Уравнения Хартри-Фока-Рутаана. Неограниченный и ограниченный методы Хартри-Фока. Ограниченный метод Хартри – Фока для замкнутых оболочек. Неограниченный метод Хартри – Фока. Ограниченный метод Хартри – Фока для открытых оболочек. Операторы проектирования. Теорема Бриллюена. Базисные функции, используемые в современных квантово – химических программах. Слэтеровские базисы. Гауссовские базисы. Минимальные базисы. Расширенные базисы. Валентно-расщепленные базисы. Базисы, содержащие поляризационные и диффузные функции.

Учет энергии электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия. Ограничение кратности возбуждений. Методы CIS и CID. Ограничение размеров активного пространства. Метод CASSCF. Метод связанных кластеров. Теория возмущений Меллера – Плессета MP2 и MP4. Метод функционала плотности DFT.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

знать: теоретические основы квантовой химии, включающие ее базовый метод – метод молекулярных орбиталей, а также основные методы учета энергии электронной корреляции;

уметь: формулировать конкретные химические задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе квантовой химии; проводить математическую обработку полученных результатов и их обобщение, оценивать сравнительную точность результатов, полученных в литературе другими авторами разными квантово-химическими;

владеть: начальными практическими навыками расчетов по одной из современных квантово-химических программ, навыками поиска физико-химических данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применять их при решении практических химических задач.

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы (72ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2.

4. Физическая химия

Целями настоящей дисциплины является подготовка квалифицированных научных кадров в области физической химии, способных вести научно-исследовательскую работу, самостоятельно ставить и решать актуальные научные и практические задачи в сфере наукоемких технологий и их практическая подготовка к дальнейшей самостоятельной работе в области химии, физики живых систем, материаловедении, технологии наноматериалов и др..

Задачами дисциплины являются:

- ознакомление обучающихся с предметом, принципами, методами и моделями физической химии;
- приобретение обучающимися теоретических знаний, практических умений и навыков в области исследований молекулярных систем;

Краткое содержание дисциплины:

Необходимые сведения из математики, физики и химии. Формулы комбинаторики и теории вероятности. Матрицы и определители. Формулы аналитической геометрии и линейной алгебры. Производные, интегралы и ряды Тейлора элементарных функций. Теоремы Стокса и Гаусса-Остроградского. Основное уравнение термодинамики, энтропия и термодинамические потенциалы. Электродинамические уравнения Максвелла. Уравнение Шредингера. Основные химические элементы, классы химических соединений и их химические свойства.

Квантовая теория строения атомов и молекул. Основы квантовой теории многоэлектронных систем. Химическая радиоспектроскопия, ЯМР и ЭПР. Химический сдвиг и спин-спиновое взаимодействие в ЯМР. Сверхтонкая структура спектров ЭПР.

Строение и свойства конденсированного вещества. Строение и свойства твердого тела. Природа сил взаимодействия в кристаллах. Колебания и волны в одномерной решетке. Колебания атомов трехмерной кристаллической решетки. Нормальные колебания. Электрон в периодическом поле. Приближение слабо и сильно связанных электронов. Зоны Бриллюэна. Структура энергетических зон. Локализованные состояния электронов в кристалле. Основы теории жидкого состояния вещества.

Элементарные атомно-молекулярные процессы.

Химическая термодинамика. Тепловой эффект химической реакции. Закон Гесса. Химический потенциал и химическое сродство. Энтальпия и энтропия химической реакции. Термодинамическое равновесие при наличии химических реакций. Химические и фазовые равновесия. Правило фаз Гиббса. Термодинамическая теория растворов. Концентрации и активности. Поверхностные явления.

Химическая кинетика. Механизм и скорость химической реакции. Константа скорости. Закон Аррениуса. Кинетика сложных реакций. Обратимые, последовательные, параллельные процессы. Прямая и обратная кинетическая задача. Метод квазистационарных концентраций. Кинетика химических реакций в открытых системах. Стационарные режимы. Химические реакции в жидкой фазе. Сопряженные реакции. Индуцированные и гомогенно-каталитические реакции. Механизм гомогенного катализа. Кинетика гомогенно-каталитических реакций. Кислотно-основный катализ. Ферментативный катализ. Автокатализ. Гетерогенный катализ.

Кинетика фотохимических реакций. Законы фотохимии. Классификация фотохимических реакций. Кинетика цепных химических реакции. Тепловой взрыв. Разветвленно-цепные реакции. Реакции с энергетическим и вырожденным разветвлением цепей. Автокаталитические реакции. Автоколебательные реакции.

Линейная неравновесная термодинамика

Принцип локального термодинамического равновесия. Уравнения баланса и законы сохранения. Уравнение Умова. Производство энтропии, потерянная работа и некомпенсированная теплота при неравновесных процессах. Функция диссипации. Соотношение взаимности Онзагера и принцип Кюри.

Нелинейная теория открытых систем.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать: основные физические подходы, используемые при изучении химических превращений вещества.

Уметь: применять современные методы аналитического анализа физико-химических процессов, результатов проведения исследований с использованием современного математического аппарата; делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных и планировать последующую научную работу; делать оптимальный выбор методов для решения поставленных задач.

Владеть: основными принципами использования фундаментальных научных знаний в сфере профессиональной деятельности, методами исследований, опираясь на фундаментальные основы химической физики и базовый аппаратный парк; стандартной терминологией и определениями.

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы (72ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-3, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-4.

5. Современные физические методы исследования материалов

Целью изучения дисциплины является подготовка квалифицированных научных кадров в области химической физики, способных вести научно-исследовательскую работу, самостоятельно ставить и решать актуальные научные и практические задачи.

Задачами дисциплины являются

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

Краткое содержание дисциплины:

Спектроскопические методы, а также методы, основанные на разделении компонент, электрохимические, рентгеноструктурные и другие. Основы магнитного резонанса. Элементарная теория резонанса. Спиновое эхо. Способы регистрации – сканирование магнитного поля, импульсные методы. Сравнение чувствительности методов ЭПР и ЯМР и оптических методов. Основы теории спектров ЭПР. g-фактор, тонкая и сверхтонкая структура спектров ЭПР. Анизотропия g-фактора и СТС. Спектры ЭПР некоторых радикалов в растворе. Спектры ЭПР некоторых комплексов переходных металлов. Практические основы метода ЭПР. Метод спиновых меток. Применения метода спиновых меток в химии и биологии. Обзор различных вариантов метода ЭПР и их приложений. Двойной электрон-электронный и двойной электрон-ядерный резонансы. ЭПР–томография.

Фурье спектроскопия ЯМР. Применение метода Фурье спектроскопии к многоспиновым системам. Расчет спектров ЯМР с учетом прямых магнитных диполь-дипольных взаимодействий. Спектры ЯМР в жидкостях в присутствии парамагнитных компонентов. Интерпретация химических сдвигов и констант спин-спинового взаимодействия. Природа химического сдвига. Химические сдвиги других ядер. Природа ядерных спин-спиновых

взаимодействий. Спин-спиновые взаимодействия протонов. Изучение молекулярной структуры методом ЯМР. ЯМР в твердых телах.

Оптическая спектроскопия. Спектр электромагнитных волн. Спектральные области. Единицы измерения. Длина волны, частота, волновое число. Законы поглощения света: закон Бугера-Ламберта, закон Бэра, коэффициент экстинкции. Способы изображения спектров (пропускание, поглощение). Поглощение света как переход между квантовыми уровнями. Электронные, колебательные и вращательные уровни. Полосы поглощения. Электронные спектры. Спектры поглощения молекул с сопряженными связями, зависимость от длины цепи сопряжения. Спектры молекулярных ионов. Комплексы с переносом заряда. Электропроводящие соединения. Спектры комплексов переходных металлов. Фотолюминесценция. Спектры ИК-поглощения и комбинационного рассеяния. Спектры отражения. Понятие о фотометрии и цветометрии.

Индукцированная эмиссия электронов. Физические основы метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Применения методов индуцированной эмиссии электронов для решения конкретных задач химической физики и материаловедения.

Электронная микроскопия.

Рентгеноструктурный анализ. Устройство монокристаллических дифрактометров. Магнитные состояния твердых тел. Методика проведения рентгеновских экспериментов. Требования к исследуемым кристаллическим образцам, понятие идеальной и идеально мозаичной кристаллы. Подготовка и проведение РСА эксперимента на конкретном кристалле.

Магнетохимия. Изготовление постоянных магнитов. Технические требования, виды постоянных магнитов. Применение магнитов в электронике, медицине и компьютерных технологиях.

В результате изучения дисциплины аспирант должен

знать: физические основы методов, используемых при изучении химических реакций.

уметь: применять стандартизованные методики проведения исследований, а при их отсутствии разрабатывать новые, обрабатывать результаты исследований с использованием современного математического аппарата; делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных и планировать последующую научную работу; делать оптимальный выбор методов для решения поставленных задач.

владеть: методами работы с основными базами данных химической информации; компьютерными информационными технологиями по получению и анализу химической информации; стандартной терминологией и определениями

Общая трудоемкость дисциплины: 6 зачетных единиц (216ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-4.

6. Современные информационные технологии в научных исследованиях

Целями настоящей дисциплины являются приобретение фундаментальных знаний в области современных информационных технологий, ознакомление с моделями, методами и средствами решения функциональных задач и организации информационных процессов.

Задачами дисциплины является получение практических навыков использования современных информационных технологий для решения прикладных задач.

Краткое содержание дисциплины:

Переход к информационному обществу. Особенности информационных революций. Модели информационного общества. Сущность и цели процесса информатизации общества. Сектора информационного рынка. Единое информационное пространство. Информационные ресурсы, продукты, услуги. Особенности новых информационных технологий: модели, методы и средства их реализации. Структура рынка информационных услуг.

Основные представления об ЭВМ.

Информация и информатика. Формы и способы представления информации на ЭВМ. Единицы количества информации. Системы счисления. Общие сведения об ЭВМ. Основные характеристики, области применения ЭВМ различных классов; функциональная и структурная организация процессора; организация памяти ЭВМ; основные стадии выполнения команды; организация прерываний в ЭВМ; организация ввода-вывода; периферийные устройства; архитектурные особенности организации ЭВМ различных классов; параллельные системы; понятие о многомашинных и многопроцессорных вычислительных системах.

Информационные технологии в телекоммуникации. Классификация информационно-вычислительных сетей. Способы коммутации. Сети одноранговые и “клиент/сервер”. Уровни и протоколы. Эталонная модель взаимосвязи открытых систем. Аналоговые каналы передачи данных. Способы модуляции. Модемы. Цифровые каналы передачи данных. Разделение каналов по времени и частоте. Характеристики проводных линий связи. Спутниковые каналы. Сотовые системы связи. Кодирование информации. Количество информации и энтропия. Самосинхронизирующиеся коды. Способы контроля правильности передачи информации. Высокоскоростные локальные сети. Организация корпоративных сетей. Функции сетевого и транспортного уровней. Алгоритмы маршрутизации. Протоколы TCP/IP. Протоколы управления. Адресация в Internet. Особенности технологий Frame Relay, ATM, SDH. Сетевые операционные системы. Технологии распределенных вычислений. Протоколы файлового обмена, электронной почты, дистанционного управления. Виды конференц-связи. Web-технологии. Языки и средства создания Web-приложений.

Информационные технологии в управлении. Компьютерные технологии подготовки текстовых документов и электронных таблиц, основанные на принципе WYSIWYG. Пакеты прикладных программ по автоматизации делопроизводства (MS Office, OpenOffice). Текстовые процессоры, электронные таблицы и средства для создания и представления презентаций. Системы подготовки документов не использующие принцип WYSIWYG. LaTeX, особенности, расширения, трансляция файлов. Информационные технологии управления проектами и планирования средств. Базы данных.

Технологии программирования, методы решения задач математической физики. Основные этапы решения задач на ЭВМ; критерии качества программы; диалоговые программы; дружелюбность, жизненный цикл программы; постановка задачи и спецификация программы; способы записи алгоритма; программа на языке высокого уровня; стандартные типы данных. Основные понятия и модели: объект, класс, данные, методы, доступ, наследование свойств; системы объектов и классов; проектирование объектно-ориентированных программ: методы и алгоритмы; объектно-ориентированные языки; классификация, архитектура, выразительные средства, технология применения; интерфейс: правила организации, методы и средства программирования; объектно-ориентированные системы: методы, языки и способы программирования.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен **знать**: возможности современных информационных технологий; программные средства для подготовки различного рода документов с применением информационных технологий; программные средства для поддержки и принятия решений в управлении; основные принципы построения информационных сетей, сложных динамических систем; принципы построения операционных систем и прикладных программных продуктов.

Уметь: использовать в своей деятельности Системы управления содержимым (контентом) (CMS-системы); работать с TeX-подобными документами; планировать научные исследования и свою деятельность с использованием систем принятия решений в управлении; использовать мощные вычислительные ресурсы.

Иметь навыки: работы в информационно-поисковых системах; подготовки документов сложной структуры; построения и анализа графиков управления проектами; работы в Linux-подобных операционных системах.

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы (72ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-5, ОПК-1, ПК-2, ПК-3.

7. Кинетика реакций в конденсированной фазе

Целью настоящей дисциплины является подготовка высококвалифицированных научных кадров в области кинетики и механизма химических процессов в конденсированной фазе, владеющих теоретическими основами химической науки, необходимыми экспериментальными навыками и способных самостоятельно ставить и решать актуальные научно-исследовательские и практические задачи.

Задачами дисциплины являются

- формирование у аспирантов системы знаний по химической кинетике, позволяющих устанавливать механизм сложных реакций, основных понятий по современным экспериментальным методам изучения химических реакций, навыков самостоятельного ведения экспериментальных исследований;
- освоение теоретических основ протекания элементарных и сложных многостадийных химических процессов с целью анализа и интерпретации экспериментальных данных, а также прогнозирования возможностей промышленного использования изучаемых процессов;
- обучение навыкам систематического подхода к решению химических и технологических задач фундаментального и прикладного характера, методам планирования кинетического эксперимента и обработки его результатов, систематизации, критического анализа и обобщения литературных данных;
- развитие способности к научно-исследовательской работе и выработка потребности к самостоятельному приобретению знаний по химической кинетике элементарных и сложных химических процессов в конденсированной фазе.

Краткое содержание дисциплины:

Введение в курс «Кинетика реакций в конденсированной фазе». История становления химической кинетики как науки, ее основоположники. Основные законы химической кинетики: закон действующих масс, закон Аррениуса (энергия активации, предэкспоненциальный множитель). Простые и сложные реакции. Кинетика и строение вещества. Связь кинетики и термодинамики.

Особенности жидкого состояния вещества. Диффузия, кинетика реакций, контролируемых диффузией. Клеточный эффект и его экспериментальное проявление.

Биомолекулярные реакции в жидкой фазе. Теория столкновений, теория активированного комплекса. Влияние давления на скорость реакции.

Кинетика жидкофазных реакций с участием реагентов различной природы: ионов, полярных молекул, молекулярных комплексов и переноса электрона.

Радикальные реакции. Реакции распада молекул на свободные радикалы. Распад с разрывом одной связи. Реакции распада свободных радикалов. Реакции рекомбинации и диспропорционирования радикалов. Реакции радикального замещения и присоединения радикалов к молекулам. Реакции отрыва. Факторы, влияющие на константу скорости реакции. Цепные реакции. Радикальная полимеризация. Жидкофазное окисление углеводородов. Вырожденное разветвление в окислении. Ингибиторы окисления (антиоксиданты). Биоантиоксиданты.

Реакции молекул. Изомеризация и распад молекул: цис-транс-изомеризация олефинов, реакции циклизации и дециклизации молекул, распад молекул. Бимолекулярные реакции с согласованной перегруппировкой связей.

Корреляционные уравнения в кинетике жидкофазных реакций.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

знать: предмет, цели, задачи и возможности кинетических методов изучения химических реакций; представления о химическом процессе как совокупности элементарных стадий с участием исходных и промежуточных веществ различной природы.

Уметь: проводить грамотное экспериментальное изучение кинетических закономерностей одностадийных и сложных химических реакций с использованием стандартных методик, а при их отсутствии – разрабатывать новые; применять стандартизованные методики компьютерной и кинетической обработки с использованием современного математического аппарата; квалифицированно интерпретировать экспериментально полученные результаты с целью установления механизма изучаемой реакции, нахождения связи между строением молекул (интермедиатов) и их реакционной способностью; делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных.

Владеть: методами поиска и обмена информацией в глобальных и локальных компьютерных сетях, техническими и программными средствами, используемыми в современной химической кинетике; обоснованными рекомендациями по способам управления химическими реакциями (воздействия на скорость протекания) путем изменения температуры, природы растворителя, воздействия лучистой энергии, введения инициаторов и т.п.

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы (72ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-3, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-4.

8. 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.

Задачами дисциплины являются

- 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. Уравнение Аррениуса. Теория активированного комплекса. Способы интенсификации химических процессов. Понятие о гомогенном, гетерогенном и ферментативном катализе. Биомиметика.

Введение в полуэмпирические и неэмпирические методы расчета структуры, свойств и реакционной способности молекул. Базисные наборы в квантовой химии.

Значение неэмпирических расчетов для понимания природы реакционной способности молекул. Метод индексов реакционной способности. Применение теории возмущения для описания реакционной способности. Зарядовый и орбитальный контроль. Концепция жестких и мягких кислот и оснований.

Симметрия и свойства молекул. Точечные группы симметрии, представления и таблицы характеров.

Модель радикальных пар. Влияние магнитных полей на химические реакции.

Классификация межмолекулярных взаимодействий. Влияние межмолекулярных сил на строение и свойства молекул и их реакционную способность.

Постулаты теории Маркуса. Формула Маркуса для энергии активации. Энергия реорганизации при переносе электрона от донора к акцептору в модели проникающих сфер.

Линейные корреляции в радикальной химии. Модель пересекающихся парабол. Радикальные реакции отрыва H атома.

Понятие об активном центре. Каталитический цикл

Многовариантность электронных состояний d-атома.

Электронная емкость кластеров. Особенности распределения электронов по d-уровням.

Изменение редокс-характеристик при переходе от моноядерных комплексов к полиядерным. Многоэлектронные процессы и проблема некомплементарности окислителей и восстановителей.

Комплементарность активного центра и субстрата. Кибернетическая функция катализатора и организованные молекулярные системы. Строение и механизмы действия наиболее важных ферментов. Активные центры нитрогеназы, цитохрома P-450, метанмонооксигеназы. Химическое моделирование ферментов.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

знать: постулаты квантовой механики, принципы квантово-механического описания многоэлектронных систем (атомов и молекул); природу химической связи и факторы, влияющие на ее прочность, а также иметь представление о современных методах расчета энергий и структурных параметров молекул и уровне точности этих методов; основные эмпирические и теоретические методы количественной оценки реакционной способности; основные принципы функционирования гетерогенных и гомогенных катализаторов, а также ферментов.

Уметь: использовать методы корреляционного анализа и квантовой химии для определения активационных барьеров и констант скорости химических реакций; обрабатывать результаты исследований с использованием современного математического аппарата; делать заключения на основании анализа и сопоставления всей совокупности имеющихся данных и планировать последующую научную работу; определять параметры линейных и нелинейных корреляционных соотношений по экспериментальным данным и результатам квантово-химического расчёта.

Владеть: опытом установления механизмов химических реакций на основании спектрально-кинетических исследований и корреляционных уравнений.

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы (72ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-4.

9. Электрохимические источники энергии и альтернативная энергетика

Целью изучения дисциплины аспирантами является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков в области альтернативной энергетике и, в частности в области электрохимических источников энергии, приобретение знаний об основных принципах действия и современных материалах, используемых в электрохимических источниках тока.

Задачами настоящей дисциплины являются

- формирование у аспирантов базисных теоретических концепций в области электрохимических источников энергии;
- ознакомление с перспективными направлениями исследований в альтернативной энергетике, с потенциально возможными практическими реализациями фундаментальных

научных результатов.

Краткое содержание дисциплины:

Введение в курс "Электрохимические источники энергии и альтернативная энергетика". Гидроэнергетика. Гидроэнергетические ресурсы. Типы гидроэнергетических установок. Основные схемы использования водной энергии. Солнечная энергетика. Ветроэнергетика. Введение в курс "Электрохимические источники энергии и альтернативная энергетика" Виды возобновляемой энергии. Электрохимические источники энергии. Аккумуляторы с воздушными электродами. Редокс-батареи. Суперконденсаторы (ионисторы). Литиевые аккумуляторы. Топливные элементы. Экологические проблемы и альтернативная энергетика

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

знать:

теоретические основы электрохимических процессов, протекающих в различных электрохимических источниках энергии, включая строение двойного электрического слоя, термодинамику и кинетику этих процессов, коррозионные процессы; типы электрохимических источников тока, историю их развития, принципы работы, конструкционные особенности; материалы и электролиты, используемые в этих устройствах; области применения и ограничения для использования электрохимических устройств разных типов.

Уметь:

использовать теоретические знания для описания работы и причин деградации электрохимических источников энергии; выбирать материалы для построения электрохимических источников энергии; подбирать методы для характеристики работы электрохимических источников энергии.

(Владеть) или иметь опыт:

методами сборки топливных элементов на основе твердых полимерных электролитов или твердых оксидов, суперконденсаторов и литий-ионных батарей; работы с периодической литературой (поиск и анализ) по заданным тематикам.

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы (72ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-4.

10. Педагогика высшей школы

Целями освоения дисциплины «Педагогика высшей школы» являются:

- формирование у аспирантов готовности к осуществлению профессиональной педагогической деятельности в сфере высшего образования;
- формирование и развитие общепрофессиональных компетенций в области высшего образования для успешного решения профессиональных задач;
- овладение компетенциями, связанными с процессом непрерывного профессионального самообразования и личностного самосовершенствования.

В задачу изучения дисциплины входит формирование профессионального мышления, развитие системы ценностей, смысловой и мотивационной сфер личности, направленных на гуманизацию образования в высшей школе; приобретение опыта анализа профессиональных и учебных проблемных ситуаций, организации профессионального общения и взаимодействия, принятия индивидуальных и совместных решений, рефлексии и развития деятельности преподавателя высшей школы; приобретение опыта по реализации основных образовательных программ и учебных планов высшего профессионального образования на уровне, отвечающем федеральным государственным образовательным стандартам; проведение исследований частных и общих проблем высшего профессионального образования.

Краткое содержание дисциплины:

Педагогика высшей школы в системе наук о человеке. Цели высшего профессионального образования. Содержание высшего профессионального образования. Дидактика. Сущность и закономерности процесса обучения. Методы обучения. Педагогические технологии. Информационно-компьютерные технологии обучения. Организационные формы обучения. Самостоятельная работа студентов. Научно-исследовательская работа студентов. Система контроля учебной деятельности студентов. Воспитание в образовательном процессе ВУЗа. Теория воспитания. Студенческое самоуправление.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

знать: нормативные основания образовательного процесса и его практической организации, а также основные принципы и системы организации преподавания в высшей школе.

Уметь: формулировать и решать педагогические задачи при разработке и реализации учебных программ курсов.

Владеть: культурой труда педагога; способами, приемами и формами организации учебного процесса.

Общая трудоемкость дисциплины: 1 зачетная единица (36ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-5, ОПК-3.

Элективные дисциплины (по выбору)

11. Современные химические технологии на основе исследований в области химической физики

Целью изучения дисциплины аспирантами является использование фундаментальных знаний и практических навыков для разработки современных промышленных химических процессов и производств, взаимосвязь фундаментальных научных исследований с основами создания масштабных химических производств.

К **задаче** изучения относится выработка у учащихся навыков систематического подхода к решению химических и технологических задач фундаментального и прикладного характера.

Краткое содержание дисциплины:

Введение. Базовые продукты нефте- и газохимии. Особенности промышленных процессов и катализаторов. 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. Современные процессы переработки газового сырья.

Научные основы новых технологических методов химической переработки попутных нефтяных газов в ценные химические продукты. Мембранно-каталитические процессы переработки газового сырья добавленной стоимостью.

Разработка современных процессов гидрирования органических соединений. Разработка бесфильтрационной технологии каталитического гидрирования. Классификация и свойства основных промышленных полимерных продуктов. Процессы статистической, селективной олигомеризации и регулируемой полимеризации этилена и других олефинов. Макрокинетические особенности современных технологических процессов.

Введение в макрокинетику химико-технологических процессов. Разработка современных химико-технологических процессов с использованием сверхкритических флюидов.

Научные основы метода фильтрационного горения. Методологические и экономические аспекты масштабирования новых технологий в нефтегазохимии

Конъюнктурные и маркетинговые исследования инновационных коммерчески ориентированных процессов нефтегазохимической отрасли. Особенности перехода работ от стадии фундаментальных исследований к решению задач прикладного характера для разрабатываемых процессов.

Определение основных технико-экономических показателей газо- и нефтехимических процессов, готовых к промышленной реализации.

Особенности масштабирования и отработки технологий получения высокомолекулярных соединений и нефтехимических продуктов на укрупненных стендовых установках. Принципы системного инжиниринга химических процессов для создания комплексных нефтехимических производств.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

знать: структуру сырьевой базы нефтехимической и газохимической отрасли; базовые продукты нефте- и газохимии; основные промышленные технологии их получения; научные основы технологических процессов переработки природного и попутного нефтяного газа; основы мембранных каталитических технологий переработки газового сырья; основы современных технологий селективного гидрирования; научные основы процессов регулируемой полимеризации олефинов; основные технологии получения крупнотоннажных композиционных материалов конструкционного и функционального назначения; основы макрокинетики технологических процессов; современные химико-технологические процессы с использованием сверхкритических флюидов.

Уметь: оценивать и прогнозировать эффективность, селективность и экологическую безопасность химико-технологических процессов; предлагать адекватные схемы технологического оформления химических реакций.

Владеть: методами математического моделирования и вычислительного эксперимента для анализа тепловых режимов, устойчивости, оптимизации, компьютеризации и управления технологическими процессами, определения их экономической эффективности; навыками работы со специальной и справочной технической литературой для выбора необходимых схем технологического оформления химических процессов с целью их оптимизации.

Приобрести опыт деятельности: в анализе, формулировке и решении конкретных химических задач, интересующих химическую технологию.

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы (72ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-3, ПК-4.

12. Фундаментальное материаловедение и технологии перспективных функциональных материалов

Целью настоящей дисциплины является формирование знаний и умений в области физического материаловедения и современной физико-химической инженерии перспективных функциональных и конструкционных материалов (в том числе работающих в экстремальных условиях эксплуатации), а также практических навыков аттестации структуры и свойств материалов с использованием современных экспериментальных методов.

Задачами дисциплины являются формирование у аспирантов основных понятий и системных представлений о методах исследования структуры и свойств функциональных материалов, физико-химических принципах конструирования новых материалов, а также подготовка квалифицированных научных кадров, способных самостоятельно решать актуальные научные и практические задачи в области физического материаловедения.

Краткое содержание дисциплины:

Физико-химические основы технологий получения и обработки перспективных материалов. Тенденции развития современного материаловедения. Конструкционные,

функциональные и многофункциональные материалы. Принципы классификации материалов (по составу, структуре, свойствам и областям применения). Структурная иерархия материалов. Наноматериалы и их классификация. Гибридные материалы: новые подходы к дизайну многофункциональных материалов.

Прочность и пластичность материалов. Упругость. Закон Гука. Виды деформации. Характеристики механических свойств твердых тел. Модуль Юнга поликристаллов. Дефекты кристаллического строения (точечные, линейные, планарные и трехмерные дефекты). Точечные дефекты: термодинамика образования, равновесная концентрация, кластеры точечных дефектов. Теоретическая и реальная прочность кристаллов. Введение в дислокации (класс линейных дефектов). Диффузия в твердых телах. Внутренние и внешние поверхности раздела твердых тел (планарные дефекты кристаллического строения). Твердые растворы, химические соединения, гетерогенные структуры. Формирование метастабильных и аморфных фаз.

Физико-химические принципы конструирования новых материалов. Способы повышения удельной прочности. Легирование. Микроструктурный и фазовый дизайн материалов. Порошковая металлургия и технологии получения металлических, керамических и композиционных материалов методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. Физико-химические основы инженерии жаропрочных материалов. Компьютерный дизайн и создание пористых материалов с капиллярным охлаждением. Научные основы создания высокопрочных медицинских сплавов. Требования к материалам, используемым для биомедицинских целей. Биохимическая и биомеханическая совместимость. Физико-химические принципы разработки и создания керамических (биоинертных, биоактивных и биорезорбируемых объемных материалов и покрытий), полимерных и композиционных биоматериалов.

Функционализация материалов поверхностной обработкой. Фемтосекундная лазерная и плазменная обработки при атмосферном давлении. Физические принципы формирования покрытий с высокой адгезионной прочностью при ионно-плазменном напылении в вакууме и среде низкого давления. Методы формирования покрытий с использованием ускоренных кластеров и макрочастиц. Механизмы формирования многокомпонентных ионно-плазменных жаростойких покрытий. Ионная имплантация материалов. Физико-химические основы синтеза углеродных наноматериалов (фуллеренов, нанотрубок, графена).

Физические принципы адсорбционных способов хранения водорода. Основные понятия адсорбции.

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны будут:

знать: общие представления о классификации, структуре и свойствах современных материалов, наноматериалов, биоматериалов, общие закономерности в изменении функциональных характеристик при варьировании кристаллической, дефектной структуры, микроструктуры и способов получения материалов.

Уметь: вычленять главное при проработке соответствующего литературного материала и проводить его критический анализ; предлагать адекватные методы получения при дизайне материалов с заданными функциональными характеристиками; применять современные методики проведения исследований структуры, механических и физико-химических свойств материалов; давать предложения при постановке или интерпретации эксперимента по получению и исследованию материалов; планировать экспериментальную работу, анализировать полученные результаты и делать заключения на основании комплекса имеющихся данных, обрабатывать результаты исследований с использованием современного математического аппарата.

Владеть: терминологией описания структуры, свойств и методов получения современных материалов; использования теоретического и экспериментального материала по структуре и свойствам изучаемых объектов для анализа экспериментальных данных; техникой

проведения качественных и полуколичественных оценок параметров структуры и свойств функциональных материалов.

Общая трудоемкость дисциплины: 2 зачетные единицы (72ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-4.

Вариативная часть

13. Педагогическая практика

Целями педагогической практики являются :

развитие профессионально-педагогических способностей;

овладение основами педагогического мастерства, умениями и навыками самостоятельного ведения учебно-воспитательной и преподавательской работы в ВУЗе;

приобретение навыков педагога-исследователя, владеющего современным инструментарием науки для поиска и интерпретации информационного материала с целью его использования в педагогической деятельности.

Задачи педагогической практики:

закрепление теоретических знаний и практических умений аспиранта по дисциплинам соответствующей научной специальности;

изучение методик преподавания, подготовки и проведения лекционных и семинарских занятий со студентами и закрепление теоретических знаний в этой области на практике;

приобретение навыков разработки учебно-методических материалов; развитие навыков самообразования, активизация педагогической деятельности аспирантов.

Педагогическая практика представляет собой вид практической деятельности аспиранта по осуществлению учебного процесса, включающего преподавание специальных дисциплин, организацию учебной и научно-исследовательской деятельности студентов.

Основное содержание практики:

Ознакомительный этап.

Инструктаж по месту прохождения практики. Составление плана прохождения практики.

Изучение нормативной базы, документации учебного процесса. Планирование учебного процесса в соответствии материально-технической базой.

Руководство НИР студентов, участие в проведении занятий. Планирование, разработка и проведение лекционных, практических, семинарских и лабораторных занятий.

Руководство курсовой работой студентов.

Отчет. Подготовка отчета по педагогической практике.

В результате педагогической практики аспиранты должны:

Знать:

- правовые и нормативные основы функционирования системы образования;
- порядок реализации основных положений и требований документов, регламентирующих деятельность ВУЗа, института по совершенствованию учебно-воспитательной, методической и научной работы на основе государственных образовательных стандартов;
- порядок организации, планирования, ведения и обеспечения учебно-образовательного процесса с использованием современных информационных технологий обучения;
- научные основы профильной дисциплины;
- содержание преподаваемого предмета.

Уметь:

- формировать общую стратегию проведения занятий;
- конкретизировать цель изучения любых фрагментов учебного материала занятий;
- системно анализировать и выбирать образовательные компетенции;
- учитывать в педагогическом взаимодействии особенности студентов;
- проектировать образовательный процесс;

- выполнять анализ результатов педагогических экспериментов, проводимых с целью повышения эффективности обучения.

Владеть:

- техникой речи и правилами поведения при проведении занятий;
- способами ориентации в профессиональных источниках информации, включая специализированные базы данных;
- различными средствами коммуникации в профессиональной деятельности;
- навыками работы с современными информационными технологиями.

Общая трудоемкость дисциплины: 3 зачетные единицы (108 ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-5, ОПК-3, ПК-3.

14. Научно-исследовательская практика

Целью научно-исследовательской практики является формирование у аспирантов готовности к научно-исследовательской деятельности в области химии, физики и биологии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий; а также формирование и развитие профессиональных знаний в сфере избранной специальности, закрепление полученных теоретических знаний по дисциплинам направления и специальным дисциплинам аспирантских программ.

Основными **задачами** НИП аспиранта являются:

- формирование умений использовать современные технологии сбора информации;
- приобретение навыков участия в коллективной научно-исследовательской работе в составе организации;
- знакомство с современными методиками и технологиями работы в научно-исследовательских организациях;
- формулирование результатов научного исследования в виде доклада на научных семинарах, школах, конференциях, симпозиумах;
- овладение профессиональными умениями проведения содержательных научных дискуссий, оценок и экспертиз;
- сбор фактического материала для подготовки диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

Основное содержание практики:

Организационно-подготовительный этап.

1. Самостоятельное составление индивидуального задания и календарного плана-графика прохождения практики и утверждение его у своего научного руководителя.
2. Ознакомление с тематикой исследовательских работ в данной области, формулирование темы, цели и задач исследования.
3. Изучение методов анализа и обработки экспериментальных данных.
4. Изучение информационных технологий в научных исследованиях, программных продуктов, относящихся к профессиональной сфере.
5. Изучение требований к оформлению научно-технической документации.

Научно-исследовательский этап.

1. Сбор, обработка, анализ и систематизация фактического и литературного материала по теме исследования.
2. Подготовка обзора литературы по выбранной теме исследования.
3. Обработка и анализ полученных ранее экспериментальных данных, включая их статистическую обработку и выводы о достоверности.
4. Подготовка тезисов доклада или научной статьи для публикации.

Заключительный этап.

1. Составление отчета о научно-исследовательской практике содержащего в обязательном порядке целенаправленный обзор литературы по проблематике проводимого

исследования, а также проанализированные и обработанные экспериментальные материалы, готовые для включения в кандидатскую диссертацию.

Прохождение научно-исследовательской практики направлено на подготовку будущего специалиста к решению профессиональных задач, связанных с научно-исследовательской деятельностью. Результаты освоения программы научно-исследовательской практики используются аспирантами в их научно-исследовательской деятельности, в публикации статей в рецензируемых журналах из перечня ВАК, в подготовке текста научного доклада об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации).

В результате научно-исследовательской практики аспиранты должны:

знать:

- основы методики выполнения научных исследований, планирования и организации научного эксперимента, обработки научных данных;
- требования к представлению и результатам научного исследования;
- основные научные конференции, где могут быть представлены результаты проведенного научного исследования.

Уметь:

- формулировать результаты научного исследования в виде доклада на конференции, писать заявку на участие в конференции, кратко представлять основные результаты проведенного исследования;
- вести научную дискуссию и защищать представляемые результаты;
- представлять результаты исследования в публикациях.

Владеть:

- навыками разработок программы исследования и проведения исследований;
- опытом представления результатов исследований на научных конференциях.

Общая трудоемкость дисциплины: 3 зачетные единицы (108 ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции: УК-1, УК-4, УК-5, ОПК-1, ПК-2, ПК-3.

15. Научные исследования

В результате проведения научных исследований обучающийся должен

знать: современное состояние науки, основные направления научных исследований, приоритетные задачи; основную специальную литературу по теме исследований: монографии, специализированные журналы; характеристику объекта и условия исследования; правила организации научных исследований по своей теме; принципы, на которых построены методики проведения исследования и обработки полученных результатов; порядок внедрения результатов научных исследований и разработок; правила формирования сводных таблиц результатов и списка литературы.

уметь: формулировать цели и задачи научного исследования; вести поиск литературных источников по разрабатываемой теме с целью их использования при выполнении диссертации; анализировать, систематизировать и обобщать научно-техническую информацию по теме исследований; проводить исследования согласно специальным методикам; работать с прикладными научными пакетами и редакторскими программами, используемыми при проведении научных исследований и разработок; проводить соответствующую математическую обработку результатов и формировать сводные таблицы.

владеть: методами исследования и проведения экспериментальных работ; методами анализа и обработки экспериментальных данных; методами проведения анализа научной и практической значимости проводимых исследований; методами оформления результатов научных исследований (оформление отчёта, написание научных статей, тезисов докладов).

Общая трудоемкость дисциплины: 195 зачетных единиц (7020 ч)

Форма аттестации: зачет

Формируемые компетенции УК-1, УК-3, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4.

Базовая часть

16. Государственная итоговая аттестация

Формируемые компетенции ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, УК-1, УК-2, УК-3, УК-4, УК-5, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4.

Государственный экзамен

На государственном экзамене проверяется сформированность следующих компетенций: готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования;

наличие широкой фундаментальной подготовки в современных направлениях химической науки, глубокой специализированной подготовки в области физической химии.

Общая трудоемкость дисциплины: 3 зачетные единицы (108 ч)

Формируемые компетенции:

УК-1, УК-3, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ПК-1, ПК-3, ПК-4.

Научный доклад об основных результатах подготовленной научно-квалификационной работы (диссертации)

уметь: проводить теоретические и экспериментальные исследования; применять основные законы химии и информацию из баз данных при анализе полученных результатов.

владеть: способностью проведения научного исследования; основами новейших информационно-коммуникационных технологий; практическими навыками и знаниями использования компьютерных технологий в научных исследованиях; современными компьютерными технологиями для сбора и анализа научной информации; методами и технологиями межличностной коммуникации; навыками публичной речи; аргументацией, ведения дискуссии; методикой критического анализа данных из мировых информационных ресурсов и их соотнесения с полученными результатами исследований.

Общая трудоемкость дисциплины: 6 зачетных единиц (216 ч)

Формируемые компетенции; УК-1, УК-2, УК-4, УК-5, ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4.