



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

И.А. Кузнецова

2021 года

Аннотация дисциплины «История и философия науки»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «История и философия науки» относится к базовой части блока Б1.
2. Целью освоения данной дисциплины является формирование у аспирантов целостного понимания предмета и основных концепций современной философии науки, развитию философского подхода к проблеме возникновения науки и основных стадий ее исторической эволюции.
Данная дисциплина направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по дисциплине «История и философия науки».
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 часов.
4. Содержание дисциплины:

Часть 1. Общие проблемы философии науки

1. Предмет и основные концепции современной философии науки.

Три аспекта бытия науки: наука как генерация нового знания, как социальный институт, как особая сфера культуры.

Логико-эпистемологический подход к исследованию науки. Позитивистская традиция в философии науки. Расширение поля философской проблематики в постпозитивистской философии науки. Концепции К.Поппера, И.Лакатоса, Т.Куна, П.Фейерабенда, М.Полани.

Социологический и культурологический подходы к исследованию развития науки. Проблема интернализма и экстернализма в понимании механизмов научной деятельности. Концепции М.Вебера, А.Койре, Р.Мертон, М.Малкея.

2. Наука в культуре современной цивилизации

Традиционалистский и техногенный типы цивилизационного развития и их базисные ценности. Ценность научной рациональности.

Наука и философия. Наука и искусство. Роль науки в современном образовании и формировании личности. Функции науки в жизни общества (наука как мировоззрение, как производительная и социальная сила).

3. Возникновение науки и основные стадии её исторической эволюции.

Преднаука и наука в собственном смысле слова. Две стратегии порождения знаний: обобщение практического опыта и конструирование теоретических моделей, обеспечивающих выход за рамки наличных исторически сложившихся форм производства и обыденного опыта.

Культура античного полиса и становление первых форм теоретической науки. Античная логика и математика. Развитие логических норм научного мышления и организаций

науки в средневековых университетах. Роль христианской теологии в изменении созерцательной позиции ученого: человек творец с маленькой буквы; манипуляция с природными объектами – алхимия, астрология, магия. Западная и восточная средневековая наука.

Становление опытной науки в новоевропейской культуре. Формирование идеалов математизированного и опытного знания: оксфордская школа, Роджер Бэкон, Уильям Оккам. Предпосылки возникновения экспериментального метода и его соединения с математическим описанием природы. Г.Галилей, Френсис Бэкон, Р.Декарт. Мировоззренческая роль науки в новоевропейской культуре. Социокультурные предпосылки возникновения экспериментального метода и его соединения с математическим описанием природы.

Формирование науки как профессиональной деятельности. Возникновение дисциплинарно-организованной науки. Технологические применения науки. Формирование технических наук.

Становление социальных и гуманитарных наук. Мировоззренческие основания социально-исторического исследования.

4. Структура научного знания.

Научное знание как сложная развивающаяся система. Многообразие типов научного знания. Эмпирический и теоретический уровни, критерии их различия. Особенности эмпирического и теоретического языка науки.

Структура эмпирического знания. Эксперимент и наблюдение. Случайные и систематические наблюдения. Применение естественных объектов в функции приборов в систематическом наблюдении. Данные наблюдения как тип эмпирического знания. Эмпирические зависимости и эмпирические факты. Процедуры формирования факта. Проблема теоретической нагруженности факта.

Структуры теоретического знания. Первичные теоретические модели и законы. Развита теория. Теоретические модели как элемент внутренней организации теории. Ограниченность гипотетико-дедуктивной концепции теоретических знаний. Роль конструктивных методов в дедуктивном развертывании теории. Развертывание теории как процесса решения задач. Парадигмальные образцы решения задач в составе теории. Проблемы генезиса образцов. Математизация теоретического знания. Виды интерпретации математического аппарата теории.

Основания науки. Структура оснований. Идеалы и нормы исследования и их социокультурная размерность. Система идеалов и норм как схема метода деятельности.

Научная картина мира. Исторические формы научной картины мира. Функции научной картины мира (картина мира как онтология, как форма систематизации знания, как исследовательская программа).

Операциональные основания научной картины мира. Отношение онтологических постулатов науки к мировоззренческим доминантам культуры.

Философские основания науки. Роль философских идей и принципов в обосновании научного знания. Философские идеи как эвристика научного поиска. Философское обоснование как условие включения научных знаний в культуру.

5. Динамика науки как процесс порождения нового знания.

Историческая изменчивость механизмов порождения научного знания. Взаимодействие оснований науки и опыта как начальный этап становления новой дисциплины. Проблема классификации. Обратное воздействие эмпирических фактов на основания науки.

Формирование первичных теоретических моделей и законов. Роль аналогий в теоретическом поиске. Процедуры обоснования теоретических знаний. Взаимосвязь логики открытия и логики обоснования. Механизмы развития научных понятий.

Становление развитой научной теории. Классический и неклассический варианты формирования теории. Генезис образцов решения задач.

Проблемные ситуации в науке. Перерастание частных задач в проблемы. Развитие оснований науки под влиянием новых теорий.

Проблема включения новых теоретических представлений в культуру.

6. Научные традиции и научные революции. Типы научной рациональности.

Взаимодействие традиций и возникновение нового знания. Научные революции как перестройка оснований науки. Проблемы типологии научных революций. Внутридисциплинарные механизмы научных революций. Междисциплинарные взаимодействия и "парадигмальные прививки" как фактор революционных преобразований в науке. Социокультурные предпосылки глобальных научных революций. Перестройка оснований науки и изменение смыслов мировоззренческих универсалий культуры. Прогностическая роль философского знания. Философия как генерация категориальных структур, необходимых для освоения новых типов системных объектов.

Научные революции как точки бифуркации в развитии знания. Нелинейность роста знаний. Селективная роль культурных традиций в выборе стратегий научного развития. Проблема потенциально возможных историй науки.

Глобальные революции и типы научной рациональности. Историческая смена типов научной рациональности: классическая, неклассическая, постнеклассическая наука.

7. Особенности современного этапа развития науки. Перспективы научно-технического прогресса.

Главные характеристики современной, постнеклассической науки. Современные процессы дифференциации и интеграции наук. Связь дисциплинарных и проблемно-ориентированных исследований. Освоение саморазвивающихся "синергетических" систем и новые стратегии научного поиска. Роль нелинейной динамики и синергетики в развитии современных представлений об исторически развивающихся системах. Глобальный эволюционизм как синтез эволюционного и системного подходов. Глобальный эволюционизм и современная научная картина мира. Сближение идеалов естественнонаучного и социально-гуманитарного познания. Осмысление связей социальных и внутринаучных ценностей как условие современного развития науки. Включение социальных ценностей в процесс выбора стратегий исследовательской деятельности. Расширение этоса науки. Новые этические проблемы науки в конце XX столетия. Проблема гуманитарного контроля в науке и высоких технологиях. Экологическая и социально-гуманитарная экспертиза научно-технических проектов. Кризис идеала ценностно-нейтрального исследования и проблема идеологизированной науки. Экологическая этика и ее философские основания. Философия русского космизма и учение В.И.Вернадского о биосфере, техносфере и ноосфере. Проблемы экологической этики в современной западной философии (Б.Калликот, О.Леопольд, Р.Аттфильд).

Постнеклассическая наука и изменение мировоззренческих установок техногенной цивилизации. Сциентизм и антисциентизм. Наука и паранаука. Поиск нового типа цивилизационного развития и новые функции науки в культуре. Научная рациональность и проблема диалога культур. Роль науки в преодолении современных глобальных кризисов.

8. Наука как социальный институт.

Различные подходы к определению социального института науки. Историческое развитие институциональных форм научной деятельности. Научные сообщества и их исторические типы (республика ученых 17 века; научные сообщества эпохи дисциплинарно организованной науки; формирование междисциплинарных сообществ науки XX столетия). Научные школы. Подготовка научных кадров. Историческое развитие способов трансляции научных знаний (от рукописных изданий до современного компьютера). Компьютеризация науки и ее социальные последствия. Наука и экономика. Наука и власть. Проблема секретности и закрытости научных исследований. Проблема государственного регулирования науки.

Часть 2. Философия естественных наук Философские проблемы химии

1. Объект, предмет и структура химии. Структура химического знания и ее историческое развитие.

Объект химии. Историческое развитие предметного поля химии и ее структуры. Алхимия и химия. Связь химии с развитием промышленных технологий. Вовлечение в производство органических соединений в 19 в. и развитие оснований химии. Возникновение в первой половине 20 в. теорий и технологий органического синтеза. Создание нефтехимических производств. Специфика процессов дифференциации и интеграции химических научных теорий.

2. Проблема физикализации химии. Редукционизм и антиредукционизм.

Взаимодействие физики и химии. Исторические этапы взаимодействия физики и химии: 1) проникновение отдельных понятий физики в химию; 2) проникновение в химию физических законов; 3) создание на стыке наук интегративных физико-химических теорий. Редукционизм и антиредукционизм как методологические подходы к пониманию взаимодействия химии и физики и их оценка. Качественная специфика химических процессов и невозможность их объяснения с помощью физических законов.

3. Учение о химическом составе вещества как первая концептуальная система в химии.

История химии как возникновение и развитие четырех концептуальных систем: 1) учение о составе вещества; 2) учение о химическом строении вещества (структурная химия); 3) кинетические теории; 4) теории химической эволюции. Учение о строении вещества как первая концептуальная система в химии. Проблема химического элемента. Проблема зависимости свойств вещества от его химического состава. Критика теории флогистона. Вклад Р. Бойля, Д. Дальтона, Д.М. Менделеева в развитие теории химических элементов.

4. Развитие химии в 19 в. Структурные теории в химии.

Зарождение структурной химии (Ш. Жерар, А. Кекуле, А. Купер). Вклад А.М. Бутлерова в развитие теории химического строения вещества (1861). Понятия «элемента», «системы», «структуры» в химии. «Элементаристский» и «структурный» подходы в химии. Понимание молекулы в свете структурного подхода. Пределы объяснительных возможностей структурных теорий.

5. Кинетические теории в химии.

Начало «третьего» этапа эволюции концептуальных систем в химии (1880-е гг.). Возникновение кинетических теорий как теорий химических процессов (сложноорганизованных химических систем). Факторы влияния на химические процессы: катализаторы, примеси, растворители, стенки сосудов и пр. Влияние физических факторов (температура, давление и пр.) на кинетику химических процессов.

6. Эволюционная химия.

Углубление знаний о закономерностях химического процесса и создание основ для возникновения четвертого типа концептуальных систем химии. Появление первых теорий эволюционной химии в 1960-е гг. От познания химического процесса – к познанию химической эволюции. Использование опыта биологии, методов физики и кибернетики в объяснении процессов самоорганизации химических систем с точки зрения химического эволюционизма.

7. Современные тенденции и направления развития химии. Химия в системе современного научного знания.

Химия в системе современного научного знания: от объяснения предбиологической эволюции – к эволюционной биологии. Эволюционная химия как высший этап развития концептуальных систем в химии. Современное состояние эволюционной химии. История химии как диалектический процесс, в котором познание идет через разрешение противоречий, а количественное накопление знаний переходит в качественное преобразование теории.

Часть 3. История науки

Часть 3. История химии

3.1. Общие представления об истории химии и ее методах

Цели и задачи истории химии как неотъемлемой части самой химии и ее самокритического инструмента.

Объекты, предметы и методы истории химии. Система химических наук и ее развитие.

Историческая периодизация как промежуточный результат и как инструмент исторического исследования. Историография химии и химическое источниковедение. История химической литературы (исторического значения рукописи и книги, основные общехимические и специализированные журналы, реферативные журналы справочники). История химической символики, терминологии и номенклатуры. Традиционная периодизация развития химии.

3.2. Обобщенное представление о развитии химии

3.2.1. Химические знания в Древнем мире до конца эллинистического периода

3.2.2. Химия в арабско-мусульманском мире VII–XII вв.

3.2.3. Средневековая европейская алхимия (XI–XVII вв.).

3.2.4. Ятрохимия как рациональное продолжение алхимии (XV–XVII вв.).

3.2.5. Практическая химия эпохи европейского Средневековья и Возрождения (XI–XV вв.).

3.2.6. Становление химии как науки Нового времени (XVII–XVIII вв.).

3.2.7. «Кислородная революция» в химии (конец XVIII в.).

3.2.8. Возникновение химической атомистики (конец XVIII–начало XIX вв.).

3.2.9. Рождение первой научной гипотезы химической связи (начало XIX в.).

3.2.10. Становление аналитической химии как особого направления (конец XV – середина XIX вв.).

3.2.11. Становление органической химии (первая половина XIX в.).

3.2.12. Рождение классической теории химического строения (середина - вторая половина XIX в.).

3.2.13. Открытие периодического закона (вторая половина XIX в.).

3.2.14. Развитие неорганической химии во второй половине XIX в.

3.2.15. Основные направления развития органической химии во второй половине XIX в.

3.2.16. Формирование теории химических равновесий во второй половине XIX в.

3.2.17. Актуальные химические проблемы конца XIX в.

3.3. Особенности и основные направления развития химии XX в.

3.3.1 Неорганическая химия.

3.3.2. Органическая химия.

3.3.3. Биоорганическая химия и молекулярная биология.

3.3.4. Химия высокомолекулярных соединений.

3.3.5. Фармацевтическая химия и химическая фармакология.

3.3.6. Развитие аналитической химии и методов исследования в XX в.

Общеаналитическая методология.

Развитие объектов и предметов исследования и аналитических задач

Общая характеристика возникновения, развития и значения основных исследовательских и аналитических методов XX в.

(Оптическая спектроскопия. Фемтосекундная лазерная спектроскопия и фемтахимия. Рентгеновская и гамма-спектроскопия и дифрактометрия.

Электронная микроскопия и зондовые методы. Электронография.

Масс-спектроскопия. Радиоспектроскопия. Хроматография. Операции на твердых и растворимых матрицах. Электрохимические методы. Нейтронно-активационный анализ.

Методология меченых атомов и радиохимические методы анализа. Оптически детектируемый магнитный резонанс. Магнитно-резонансная и магнитно-силовая микроскопия).

3.4. Развитие некоторых стержневых представлений химии

3.4.1. Дискретная природа материи.

3.4.2. Химические элементы.

3.4.3. Химическая связь.

3.4.4. Химическое строение.

3.4.5. Термохимия и химическая термодинамика

(Развитие представлений о химических равновесиях, химической энергии и химическом потенциале. Статистическая термодинамика в химии. Переход от термодинамики изолированных к термодинамике открытых систем, от термодинамики равновесных состояний к термодинамике стационарных и неравновесных).

4.6. Химическая кинетика

(Развитие представлений о скоростях химических реакций. Развитие представлений об элементарных актах химических взаимодействий. Развитие учения о цепных процессах.).

3.4.7. Катализ.

3.4.8. Электрохимия.

3.4.9. Фотохимия.

3.4.10. Коллоидная химия.

3.4.11. Развитие кристаллохимии.

3.5. Развитие ведущих исследовательских методов XX в.

3.5.1. Хроматография

(Поучительные особенности открытия адсорбционной хроматографии. Причины задержки и резкого возрастания интереса к ней в 1-й трети XX в. Открытие других видов хроматографии. Влияние хроматографии на развитие химии).

3.5.2. Химическая радиоспектроскопия

(Открытие и развитие применения в химии ЭПР, КМР, ПМР и ЯМР высокого разрешения. Импульсная ЯМР-спектроскопия. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Влияние радиоспектроскопии на развитие химии).

3.6. Социальный заказ, развитие химических технологий и химической науки.

Древняя металлургия золота, серебра, свинца и сурьмы, меди и ее сплавов. Металлургия железа. Керамика и стекло. Минеральные пигменты и органические красители. Технологии выпаривания, экстракции и крашения. Производство соли и поташа. Производство папирусной бумаги. Едкое кали, нашатырь, мыло. Химические производства раннего Средневековья (сахар, спирт, листовое стекло, живопись по стеклу). Химическая техника позднего европейского Средневековья (выплавка железа через передельный чугун, изготовление пороха, получение сильных кислот, закладка селитрянец и выщелачивание селитры, купоросы и квасцы, цветные эмали и стекла). Химическая техника эпохи европейского Возрождения (промышленное мыловарение, получение эфирных масел, усовершенствование металлургии меди).

Химическая промышленность начала Нового времени. Потребности стеклоделия, мыловарения, текстильной промышленности и производство соды по Леблану. Производство серной кислоты для сульфирования индиго. Беление хлором и производство «белильной извести». Производство кокса для металлургии, газа для освещения и накопление каменноугольной смолы.

Химическая промышленность XIX в. Проблемы использования каменноугольной смолы, исследования ее состава и возможности применения. Потребности в красителях для тканей и синтез ализарина и фуксина. Развитие промышленности органических красителей. Потребность во взрывчатых веществах, создание динамитов и бездымных порохов. Создание производства целлулоида. Развитие строительства и развертывание производства цементов. Появление двигателей внутреннего сгорания, проблема моторного топлива и смазочных масел.

Химическая промышленность XX в. Потребность во взрывчатых веществах и промышленный синтез аммиака. Увеличение плотности населения, распространение эпидемических заболеваний и развитие фармацевтической промышленности. Развитие электротехники, потребность в электроизоляции и развитие фенолформальдегидных полимерных материалов, полиорганосилоксанов и термостойких полимеров. Коррозия металлов и поиск химических средств и методов борьбы с ней. Недостаток природных материалов, синтез каучука и полимеризационных пластмасс. Развитие товарного сельского хозяйства и потребность в минеральных удобрениях, уничтожение межей и проблема борьбы с сельскохозяйственными вредителями. Прямая связь химической науки и промышленности. Развитие химической науки, опережающее запросы практики.

3.7. Взаимодействие химии с другими науками в их историческом развитии

3.7.1. Химия и философия.

«Предхимия» в рамках синкретической преднауки Древнего мира. Взаимосвязь этики, геометрии и превращения элементов у Платона. Химический аспект философии Аристотеля. Роль идеологии и ритуалов ранней алхимии в возникновении герметической философии, а также обрядов и символики масонства. Развитие органической химии и метаморфозы витализма. Химический состав Вселенной и представления о ее целостности.

3.7.2. Химия и математика.

Количественные меры в химии. Химическая метрология. Кристаллохимия и теория групп. Математический аппарат в физико-химических расчетах. Химическая интерпретация физического сигнала с помощью математического анализа и превращение математического аппарата в непосредственный инструмент физико-химического измерения. Место и роль математики в квантовой химии. Химия и теория графов. Проблемы макрокинетики и математического моделирования химических процессов и аппаратов. Математическое планирование и математическая оценка химического эксперимента. Математика и молекулярный дизайн.

3.7.3. Химия и физика.

«Физическая химия» у М. В. Ломоносова. Физическое измерение в химии. Физическая химия XIX в. Химическое состояние, химическое превращение и физический сигнал, «физикализация» химии в XX в. Физические явления и физические воздействия как факторы возникновения химических направлений и дисциплин. Радиохимия как фактор развития физики. Физические теории строения материи и интерпретация химической связи. Физическое объяснение химических явлений и проблема сведения химии к физике, физико-математическая интерпретация периодического закона и ее неполнота.

3.7.4. Химия, биология и медицина

Ятрохимия как медицинская ипостась алхимии. Химико-медицинская философия Парацельса. Развитие представлений о химической сущности базовых биологических процессов. Исследование брожения и других биохимических процессов. Химия и учение о ферментативных процессах. Изучение и постижение молекулярной природы наследственности. Лекарства и яды. Химическая структура и биологическая активность. Молекулярная биология и проблема сведения биологических процессов к химическим. Проблема функционирования живого как центральная проблема науки.

3.7.5. Химия и науки о Земле.

Геохимия как история распределения химических элементов и их соединений в оболочках Земли. Минералогия как химия земной коры. Биогеохимия В. И. Вернадского. Возникновение геокристаллохимии. Происхождение нефти.

3.7.6. Химия, общественные науки и общество.

Химические методы в истории и археологии. Химия и криминалистика. Химическая экология. Развитие цивилизации, химические загрязнения и проблема «самоубийственных» химических технологий. Социальные проблемы, общественные отношения и химический анализ. Формы собственности и развитие химии.

5. Форма промежуточной аттестации: кандидатский экзамен.

Аннотация дисциплины «Иностранный язык»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Иностранный язык» относится к базовой части блока Б1.
2. Целью освоения дисциплины «Иностранный язык» является формирование у аспирантов необходимого для сдачи кандидатского экзамена уровня знаний, умений и навыков в области чтения, говорения, аудирования, перевода, аннотирования, реферирования и письма.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц, 144 часа.
4. Содержание дисциплины:

1. Виды речевой коммуникации

1.1. Говорение. Аспирант должен владеть подготовленной, а также неподготовленной монологической речью, уметь делать резюме, сообщения, доклад на иностранном языке; диалогической речью в ситуациях научного, профессионального и бытового общения в пределах изученного языкового материала и в соответствии с избранной специальностью.

1.2. Аудирование. Аспирант должен уметь понимать на слух оригинальную монологическую и диалогическую речь по специальности, опираясь на изученный языковой материал, фоновые страноведческие и профессиональные знания, навыки языковой и контекстуальной догадки.

1.3. Чтение. Аспирант должен уметь читать, понимать и использовать в своей научной работе оригинальную научную литературу по специальности, опираясь на изученный языковой материал, фоновые страноведческие и профессиональные знания и навыки языковой и контекстуальной догадки. Владеть всеми видами чтения (изучающее, ознакомительное, поисковое и просмотровое).

1.4. Письмо. Аспирант должен владеть умениями письма в пределах изученного языкового материала, в частности уметь составить план (конспект) прочитанного, изложить содержание прочитанного в форме резюме; написать сообщение или доклад по темам проводимого исследования.

2. Языковой материал

2.1. Виды речевых действий и приемы ведения общения

При отборе конкретного языкового материала необходимо руководствоваться следующими функциональными категориями:

Передача фактуальной информации: средства оформления повествования, описания, рассуждения, уточнения, коррекции услышанного или прочитанного, определения темы сообщения, доклада и т.д.

Передача эмоциональной оценки сообщения: средства выражения одобрения/неодобрения, удивления, восхищения, предпочтения и т.д.

Передача интеллектуальных отношений: средства выражения согласия/несогласия, способности/неспособности сделать что-либо, выяснение возможности/невозможности сделать что-либо, уверенности/неуверенности говорящего в сообщаемых им фактах.

Структурирование дискурса: оформление введения в тему, развитие темы, смена темы, подведение итогов сообщения, инициирование и завершение разговора, приветствие, выражение благодарности, разочарования и т.д.;

владение основными формулами этикета при ведении диалога, научной дискуссии, при построении сообщения и т.д.

2.2. Фонетика

Интонационное оформление предложения: словесное, фразовое и логическое ударения, мелодия, паузация; фонологические противопоставления, релевантные для изучаемого языка: долгота/краткость, закрытость/открытость гласных звуков, звонкость/глухость конечных согласных и т.п.

2.3. Лексика

Лексический запас сдающего кандидатский экзамен должен составить не менее 5500 лексических единиц с учетом вузовского минимума и потенциального словаря, включая примерно 500 терминов профилирующей специальности.

2.4. Грамматика

Английский язык

Порядок слов простого предложения. Сложное предложение: сложносочиненное и сложноподчиненное предложения. Союзы и относительные местоимения. Эллиптические предложения. Бессоюзные придаточные. Употребление личных форм глагола в активном и пассивном залогах. Согласование времен. Функции инфинитива: инфинитив в функции подлежащего, определения, обстоятельства. Синтаксические конструкции: оборот «дополнение с инфинитивом» (объектный падеж с инфинитивом); оборот «подлежащее с инфинитивом» (именительный падеж с инфинитивом); инфинитив в функции вводного члена; инфинитив в составном именном сказуемом (*be + инф.*) и в составном модальном сказуемом; (оборот «*for + smb. To do smth.*»), Сослагательное наклонение. Модальные глаголы. Модальные глаголы с простым и перфектным инфинитивом. Атрибутивные комплексы (цепочки существительных). Эмфатические (в том числе инверсионные) конструкции в форме *Continuous* или пассива; инвертированное придаточное уступительное или причины; двойное отрицание. Местоимения, слова-заместители (*that (of), those (of), this, these, do, one, ones*), сложные и парные союзы, сравнительно-сопоставительные обороты (*as...as, not so...as, the...the*).

Французский язык

Порядок слов простого предложения. Сложное предложение: сложносочиненное и сложноподчиненное предложения. Союзы. Употребление личных форм глаголов в активном залоге. Согласование времен. Пассивная форма глагола. Возвратные глаголы в значении пассивной формы. Безличные конструкции. Конструкции с инфинитивом: *avoir à + infinitif, être à + infinitif, laisser + infinitif, faire + infinitif*. Неличные формы глагола: инфинитив настоящего и прошедшего времени; инфинитив, употребляемый с предлогами; инфинитивный оборот. Причастие настоящего времени; причастие прошедшего времени; деепричастие; сложное причастие прошедшего времени. Абсолютный причастный оборот. Условное наклонение. Сослагательное наклонение. Степени сравнения прилагательных и наречий. Местоимения: личные, относительные, указательные; местоимение среднего рода *le*, местоимения-наречия *en* и *y*.

Немецкий язык

Простые распространенные, сложносочиненные и сложноподчиненные предложения. Рамочная конструкция и отступления от нее. Место и порядок слов придаточных предложений. Союзы и корреляты. Бессоюзные придаточные предложения. Распространенное определение. Причастие I с *zu* в функции определения. Приложение. Степени сравнения прилагательных. Указательные местоимения в функции замены существительного. Однородные члены предложения разного типа. Инфинитивные и причастные обороты в различных функциях. Модальные конструкции *sein* и *haben + zu + infinitiv*. Модальные глаголы с инфинитивом I и II актива и пассива. Конъюнктив и кондиционалис в различных типах предложений. Футурум I и II в модальном значении. Модальные слова. Функции пассива и конструкции *sein + Partizip II* (статива). Трехчленный, двучленный и одночленный (безличный пассив). Сочетания с послелогами, предлогами с уточнителями. Многозначность и синонимия сою-

зов, предлогов, местоимений, местоименных наречий и т.д. Коммуникативное членение предложения и способы его выражения.

5. Форма промежуточной аттестации: кандидатский экзамен.

**Аннотация дисциплины
«Педагогика и психология высшей школы»**

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Педагогика и психология высшей школы» относится к обязательным дисциплинам вариативной части блока Б1.
2. Основной целью освоения дисциплины «Психология и педагогика высшей школы» является подготовка к преподавательской деятельности, в том числе:
 - формирование представлений об особенностях педагогической деятельности в высшей школе;
 - приобретение знаний по психологии и педагогике высшей школы: формирование мотивации учения, управление познавательной деятельностью обучающихся.
 - изучение общих принципов организации учебного процесса в высшей школе.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

Тема 1: Цели и задачи высшей школы на современном этапе.

Тенденции развития современного высшего образования в России.

Подходы к определению целей образования: обучение как формирование опыта; обучение как формирование личности профессионала.

Модель личности профессионала: профессиональная направленность, профессиональный опыт, профессионально-важные качества, индивидуальный стиль деятельности. Этапы формирования профессионала, цели и задачи работы на каждом этапе. Классификация методов обучения и воспитания в вузе.

Тема 2: Технология знаково-контекстного подхода А.А.Вербичко.

Учебная деятельность. Противоречия учебной и профессиональной деятельности. Контекстное обучение. Информация и знание. Основные принципы контекстного обучения. Модель динамического движения деятельности в контекстном обучении. Два этапа и три вида учебной деятельности: учебная деятельность академического типа, квазипрофессиональная деятельность, учебно-профессиональная деятельность. Педагогические технологии контекстного обучения. Активные методы обучения: обмен вопросами в малых группах, анализ ситуаций профессиональной деятельности, кейс-метод, деловые игры, разработка проектов и мини-проектов, взаимодействие подгрупп с ранней ролевой определенностью, дискуссии, демонстрации с привлечением студентов, социально-психологический тренинг.

Тема 3: Мотивы учения.

Структура учебной деятельности. Концепции мотивации учебной деятельности. Виды мотивов учения: познавательные и социальные мотивы. Формирование мотивов учения. Мотивация на изучение предмета, мотивация на выполнение отдельных заданий. Методические приемы: связь с практикой, ориентация на успех, принцип выбора заданий, связь с другими областями знаний, разъяснение учебных целей, личностная и профессиональная значимость целей, использование активных методов обучения, методическое разнообразие.

Тема 4: Психолого-педагогические аспекты организации учебной деятельности студентов.

Лекция как форма учебной деятельности в высшей школе. Виды лекций. Лекторское мастерство. Условия превращения лекции в интерактивную. Имидж преподавателя. Практические занятия. Формы проведения семинаров. Психолого-педагогические цели семинарских

занятий. Семинар рефератов. Семинар по типу круглого стола. Психологические контакты с аудиторией: личностный, эмоциональный, познавательный контакт. Психологические барьеры, условия преодоления барьеров. Учет познавательных возможностей слушателей. Управление вниманием аудитории. Восприятие и понимание учебного материала. Организация запоминания. Развитие мышления студентов. Организация самостоятельной работы студентов: формы и методы. Формы контроля. Проведение зачетов и экзаменов.

Тема 5: Воспитательная работа

Роль воспитательной работы со студентами. Психологическая характеристика студенчества как социальной группы: ценностные ориентации, интересы, профессиональные планы. Возрастно-психологические особенности студентов. Психологические характеристики студенческой группы.

Тема 6: На итоговой консультации разбираются выполненные аспирантами задания для самостоятельной работы по темам дисциплины.

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

Аннотация дисциплины
«Электронное обучение и дистанционные образовательные технологии»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Электронное обучение и дистанционные образовательные технологии» относится к обязательным дисциплинам вариативной части блока Б1.

2. Цели освоения дисциплины

Ознакомление с компьютерными методами формирования информационно-образовательной среды и применением электронного обучения и дистанционных технологий

3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

4. Содержание дисциплины:

1. Информационно-образовательная среда учебного процесса. Формирование понятия электронной информационно-образовательной среды. Применяемые модели. Информационно-образовательное пространство, построенное с помощью интеграции информации на традиционных и электронных носителях, компьютерно-телекоммуникационных технологиях взаимодействия, включающее в себя виртуальные библиотеки, распределенные базы данных, учебно-методические комплексы и расширенный аппарат дидактических подходов

2. Компьютерные технологии в образовательном процессе. Применения компьютерных технологий в образовательном процессе. Компьютерное тестирование. Информационное обеспечение и иллюстративная поддержка образовательного процесса. Электронные обучающие системы. Виртуальный практикум

3. Электронный учебный контент: жанры. Курсы для ВУЗовского образования. Корпоративные курсы. Курсы для поддержки очных и заочных тренингов. Курсы широкого профиля для коммерческой продажи. Курсы от вендоров («Основы фотошопа») и др.

4. Структура электронной обучающей системы. Структура электронной обучающей системы. Современное состояние электронных обучающих комплексов. Параметры, определяющие качество системы. Примеры реализации.

5. Виртуальный практикум. Виртуальный практикум. Компьютерные симуляторы. Примеры реализации.

6. Структура применения современной электронной обучающей системы. Структура применения современной электронной обучающей системы. Обучающая траектория. Методическое сопровождение.

7. Разработка электронного ресурса. Разработка электронного ресурса. Подходы и среды. Состав команды. Оформление. Создание и применение отдельных компонентов. Создание гипертекстовых документов. Специализированные среды.

8. Специализированные среды. Moodle. WebTutor. Moodle – модулярная объектно-ориентированная динамическая обучающая среда. Участники образовательного процесса. Порог доступности для различных групп. Виды ресурсов теоретической части курса. Виды ресурсов практической части. Доступ к системе. Разработка использование образовательных ресурсов в среде Moodle. WebTutor – возможности применения.

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

Аннотация дисциплины «Стилистика научной речи»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Стилистика научной речи» относится к факультативным дисциплинам.
2. Целью освоения дисциплины является повышение имеющегося у аспирантов уровня практического владения современным русским литературным языком и усовершенствование навыков создания устных и письменных текстов, принадлежащих к различным жанрам научного стиля речи.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа.
4. Содержание дисциплины:

1. Научный стиль русского литературного языка. Общая характеристика, языковые признаки.

Понятие функционального стиля. Понятие стилистической окраски. Научный стиль как функциональная разновидность литературного языка. Культура научной и профессиональной речи. Жанры научного стиля. Первичные и вторичные научные тексты. Аннотация и реферат как основные виды вторичных текстов.

2. Культура речи. Нормы современного русского литературного языка.

Понятие культуры речи. Нормативный аспект культуры речи. Лексические, грамматические и стилистические нормы. Нарушения норм, наиболее часто встречающиеся в научных текстах разных жанров.

3. Библиографическое описание.

Библиографическое описание и его элементы. Библиографические ссылки и списки: виды и особенности оформления. Нормативные документы, используемые при составлении библиографического описания, библиографических ссылок.

5. **Форма промежуточной аттестации:** зачет.

Аннотация дисциплины «Этика науки»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Этика науки» относится к факультативным дисциплинам.
2. Целью освоения дисциплины является формирование целостного философски осмысленного представления об этике науки как одной из важнейших характеристик всей современной научной деятельности.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа.
4. Содержание дисциплины:

1. Этика как наука о морали. Основания морали.

Происхождение этики. Специфика этического познания. Проблема обоснования морали. Мораль и нравы. Метаэтика. Формирование прикладной этики. Наука как объект изучения этики. Роль научной этики в современной российской науке.

2. Становление этики науки.

Разделение наук о природе и наук о духе в неокантианстве. Ценностная основа наук о духе. Представление о ценностной нейтральности и самодостаточности науки в 1-й половине XX века. Моральная рефлексия о науке во 2-й половине XX века. Плюрализм точек зрения на соотношение науки и этики в наше время. Наука и этика в эпоху глобализации.

3. Современная профессиональная этика.

Этика науки и этика ученого. Условия возникновения и функции профессиональной этики. Связь профессионализма и нравственности. Этика науки в системе профессиональной этики. Кодексы профессиональной этики, их взаимосвязь с универсальными требованиями морали.

4. Структура научной деятельности в ценностно-этическом контексте.

Знание как ценность. Идеал научности: различные понимания. Ценности научного поиска. Гуманистические ценности науки: бескорыстность, правдивость, толерантность, идея служения обществу. Культурно-мировоззренческая функция науки в социуме.

5. Этика и деонтология науки. Этические проблемы науки XXI века.

Этика науки и этика частных наук. Соотношение универсальных моральных требований, общенаучных моральных требований и норм частных наук. Различия в ценностном и нормативном аспекте точных, естественных и гуманитарных наук. Условия и предпосылки появления прикладной этики. Необходимость морального контроля областей знания, касающихся жизни и благополучия людей. Биоэтика. Биомедицинская этика. Политическая этика. Понятие и виды глобальных проблем человечества. Роль науки в их возникновении и осмыслении. Наука и экологический кризис. Экологическая этика. Этическое осмысление процессов глобализации и угроз, связанных с ней (терроризм, массовая миграция, бедность, эпидемии и т.д.).

6. Проблемы свободы и социальной ответственности в этике и деонтологии.

Понятие ответственности в этике; виды ответственности. Необходимые моральные ограничения науки как вида человеческой деятельности. Возможность различного использования научных результатов. Этика науки и этика технологии. Ответственность ученого перед человечеством, страной, научным сообществом, научной школой. Национальная принадлежность и космополитизм ученого.

7. Этика ученого сообщества.

Моратории на различные виды научных исследований. Запрет негуманных методов проведения экспериментов. Запрет социальноопасных исследований. Идеологическая нейтральность.

Признание заслуг конкурентов и коллег. Необходимость публичного признания ошибок. Нормы этикета в научном сообществе. Научные школы, направления, корпорации. Правила научного общения, дискуссии, полемики.

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

Аннотация дисциплины «Органическая химия»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Органическая химия» относится к обязательным дисциплинам вариативной части блока Б1.
2. **Целями** освоения дисциплины «Органическая химия» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:
 - знание основных законов и объектов современной органической химии;
 - представление о современных синтетических методах и способов установления структуры;
 - представления об основных механизмах органических реакций.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.
4. Содержание дисциплины:

Тема 1. Современные проблемы органической химии. Физический фундамент химии. Объекты и структура органической химии сегодня. Новые химические структуры и материалы. Методы и тенденции развития органической химии.

Тема 2. Основы современной теории химического строения. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Связи в органических соединениях. Электронные эффекты заместителей. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. Прикладные программы квантово-химического моделирования.

Тема 3. Механизмы органических реакций. Формирование связей в органических структурах. Свободнорадикальные реакции, особенности их протекания. Ионные реакции, их закономерности. Факторы управления процессами.

Тема 4. Интермедиаты и переходные состояния в органических реакциях. Карбокатионы. Карбанионы. Карбанионы. Ион-радикалы. Карбены. Переходные состояния, их характеристики. Поиск структуры переходных состояний.

Тема 5. Установление структуры органических соединений. Общая схема исследования структуры органических объектов. Атомная эмиссионная спектроскопия. Электронная спектроскопия. Методы колебательной спектроскопии. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Метод электронного парамагнитного резонанса. Метод масс-спектрометрии.

Тема 6. Методы контроля протекания органических реакций. Хроматографические методы. Электрохимические методы. Спектральные методы. Обработка результатов анализа.

Тема 7. Теория реакционной способности органических соединений. Связь структура – свойства. Методология QSAR. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной

локализации. Кислоты и основания в органической химии. Методы установления механизмов органических реакций. Общая схема изучения механизмов органических реакций. Эксперимент и компьютерное моделирование при установлении механизмов.

Тема 8. Современные синтетические методы. Планирование синтеза. Информационная поддержка синтетических исследований. Синтетический анализ в планировании органического синтеза. Ретросинтетический анализ. Активация реакционных центров. Нетрадиционные способы активации. Защитные группы в синтезе. Ассиметрический синтез. Комбинаторный синтез.

5. Форма промежуточной аттестации: кандидатский экзамен.

Аннотация дисциплины
«Современные синтетические методы в органической химии»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Современные синтетические методы в органической химии» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. **Целями** освоения дисциплины «Современные синтетические методы в органической химии» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:
 - знание теоретических основ современного органического синтеза;
 - представление о закономерностях протекания химических процессов;
 - представления о взаимосвязи строения и свойств органических веществ;
 - знание современных научных теорий химических превращений;
 - знание и применение теории реакционной способности органических соединений для решения научных и прикладных задач.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

Тема 1. Основные тенденции развития органического синтеза. Оптимизация классических и разработка новых синтетических методов. Органические реакции и синтетические методы. Методы синтеза ациклических соединений. Использование ацетиленов в синтезе ациклических соединений.

Тема 2. Реакции С-С сочетания. Металлорганические соединения и органокупраты как С-нуклеофилы. Реакция Хека. Реакция Стиле. Реакция Сузуки. Реакция Соногаширы.

Тема 3. Реакции с участием карбонильной группы. Реакция Гриньяра и родственные превращения. Алкилирование енолятов. Альдольная реакция. Реакция Михаэля. Реакции Виттига и Хорнера-Уодсворта-Эммонса. α -Гетероатомные карбанионы в реакциях с карбонильными соединениями.

Тема 4. Методы синтеза циклических систем. Методы образования трехчленного цикла. Методы образования четырехчленного цикла. Методы построения циклопентановых систем. Методы синтеза шестичленных циклов. Реакции Дильса-Альдера.

Тема 5. Синтетическое использование реакций перегруппировок. Перегруппировка Кляйзена. Реакция Кэрролла. Катализ кислотами Льюиса. Перегруппировка Коупа. Каскадные превращения с использованием перегруппировки.

Тема 6. Реакции метатезиса олефинов и ацетиленов. Механизм реакции и оптимизация металлокомплексных катализаторов. Метатезис с образованием цикла. Алкен-алкиновый метатезис. Метатезис алкинов.

5. **Форма промежуточной аттестации:** зачет.

Аннотация дисциплины
«Стратегия органического синтеза карбо- и гетероароматических структур»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Стратегия органического синтеза карбо- и гетероароматических структур» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. **Целями** освоения дисциплины «Стратегия органического синтеза карбо- и гетероароматических структур» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:
 - знание основных современных подходов к планированию многостадийных синтезов;
 - представление о синтетическом методе и ретросинтетическом анализе;
 - представления об основных методах конструирования сложных органических молекул;
 - формирование навыков синтеза сложных органических соединений,
 - знание и применение теории реакционной способности органических соединений для решения научных и прикладных задач.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

Тема 1. Введение в органический синтез. Стратегия и тактика органического синтеза. Общие принципы планирования органического синтеза; математическое и компьютерное планирование. Основные понятия: прямое и ретросинтетическое планирование, дерево синтеза, целевые и исходные соединения, синтоны, синтетические эквиваленты, реагенты, субстраты. Синтетический анализ в планировании органического синтеза.

Тема 2. Ретросинтетический анализ. Основные этапы ретросинтетического анализа. Типы стратегий в ретросинтетическом анализе. Стратегии, базирующиеся на трансформах, на функциональных группах; топологические и стереохимические стратегии. Линейный и конвергентный синтез. Трансформации: расчленение, сочленение, введение функциональной группы, изменение функциональной группы, замена одной функциональной группы на другую, перегруппировка. Выбор первичного расчленения. Синтонный подход. Соответствие синтонов, синтетических эквивалентов, реагентов. Основные типы синтонов. Нуклеофильные и электрофильные синтоны.

Тема 3. Конструирование углеродного скелета. Методы создания связи углерод-углерод. Расщепление связи углерод-углерод и перестройка углеродного скелета. Методы построения карбо- и гетероциклов. Расширение циклов по Демьянову. [2+4]-Циклоприсоединение по Дильсу-Альдеру. Типы диенов и диенофилов и характеристики их активности. Стереохимия диенового синтеза. Условия внутримолекулярного циклообразования.

Тема 4. Активация реакционных центров. Медьорганические реагенты в синтезе. Комплексы медьорганических соединений, их использование в синтезе. Использование других металлоорганических соединений в синтезе. Методы генерирования енолятов. Доноры и акцепторы Михаэля. Катализаторы реакции, ее обратимость, побочные процессы. Енамины как доноры Михаэля. Понятие о каскадных реакциях. Стабилизированные и нестабилизированные или-

ды.

Тема 5. Трансформации функциональных групп. Гидролитическое расщепление. Термическое и окислительное расщепление. Пинаколиновая и другие перегруппировки. Методы окисления органических соединений. Методы восстановления органических соединений.

Тема 6. Защитные группы в синтезе. Понятие «защитная группа». Требования к защитным группам: легкость введения, стабильность при трансформации молекулы, легкость удаления. Условия введения и удаления защитных групп, устойчивость их к действию различных реагентов (кислот, оснований, окислителей, восстановителей и др.). Метод выбора условий и реагентов. Метод «скрытой функциональности». Методы введения и удаления защитных групп. Понятие «модифицируемой» защитной группы. Защита ненасыщенных связей.

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

Аннотация дисциплины
«Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. **Целями** освоения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:
 - знание основных постулатах и математическом аппарате квантовой механики;
 - представление о приближенных методах решения квантово-механических задач;
 - представления об основных положениях квантовой химии;
 - знание о неэмпирических и полуэмпирических методах изучения электронного строения атомов и молекул, применение получаемых данных для решения научных и прикладных задач органической химии;
 - знание и применение теории реакционной способности органических соединений для решения научных и прикладных задач.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

Тема 1. Основы современной теории химического строения. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).

Тема 2. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрытие. Расширенный метод Хюккеля. Метод Хюккеля для электронных систем. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Неэмпирические методы. Методы с использованием функционалов матрицы плотности.

Тема 3. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. Ориентационная и индукционная составляющие. Дисперсионное взаимодействие. Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Водородная связь.

Тема 4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы (MOPAC, GAUSSIAN и др.).

Тема 5. Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО. Органические соединения. Приближения, используемые при расчетах и при интерпретации электронного строения органических соединений. Эффекты среды. Моделирование интермедиатов и переходных структур.

Тема 6. Теория реакционной способности органических соединений. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Поиск структуры переходных состояний.

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

Аннотация дисциплины «Компьютерная химия»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Компьютерная химия» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. **Целями** освоения дисциплины «Компьютерная химия» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:
- ознакомление аспирантов с основными направлениями применения компьютерных технологий в химии
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

Тема 1. Предмет компьютерной химии. История ее возникновения. Современный этап развития. Когда и как должна использоваться вычислительная химия.

Тема 2. Химические редакторы и базы данных. Современные основные программные продукты.

Тема 3. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений. Изучение свойств молекул при помощи методов компьютерной химии.

Тема 4. Формально-логические подходы к конструированию органических молекул и поиску новых органических реакций. Оптимизация схем синтеза органических веществ. Комбинаторная химия. Корреляция структуры природных соединений с их физико-химическими свойствами и биологической активностью. Поиск новых биологически активных веществ. Компьютерная биохимия.

Тема 5. Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.

Тема 6. Компьютерные технологии в обмене научной информацией. Основные интернет-ресурсы химического профиля, повышение эффективности доступа к ним. Поиск, хранение и обработка химической информации. Особенности представления химической информации.

5. **Форма промежуточной аттестации:** зачет.

**Аннотация дисциплины
«Механизмы органических реакций»**

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Механизмы органических реакций» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. **Целями** освоения дисциплины «Механизмы органических реакций» является формирование теоретического фундамента современной органической химии как единой, логически связанной науки, расширить и закрепить базовые понятия химии, необходимые для дальнейшего изучения различных областей естествознания, сформировать умения и навыки экспериментальной работы, самостоятельной работы с научно-технической литературой, развить способности к творчеству, в том числе к научно-исследовательской работе, и выработать потребность к самостоятельному приобретению знаний, сформировать современные представления о взаимосвязи строения и свойств органических веществ, закономерностях протекания химических процессов, научных теориях, химических превращениях органических веществ в различных условиях.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

1. Классификация реакций.

- 1.1. Промежуточные частицы органических реакций
- 1.2. Классификация реакций.
- 1.3. Реакционная способность молекул

2. Механизмы электрофильного замещения.

- 2.1. Реакции электрофильного замещения. Реализуемые механизмы. Представление о π - и σ -комплексах. Структура переходного состояния. Арениевые ионы в реакциях электрофильного замещения.
- 2.2. Влияние природы заместителя на реакционную способность аренов.
- 2.3. Кинетический и термодинамический контроль в реакции

3. Механизмы нуклеофильного замещения.

- 3.1. Классификация механизмов реакций ароматического нуклеофильного замещения
- 3.2. Структурная и каталитическая активация
- 3.3. Нуклеофильное замещение водорода

4. Механизмы радикального замещения и реакций присоединения.

- 4.1. Механизмы радикальных процессов
- 4.2. Индексы реакционной способности: индексы Фукуи, энергии радикальной локализации
- 4.3. Реакции присоединения

5. Перегруппировки и фотохимические реакции.

- 5.1. Перегруппировки и фотохимические реакции

6. Способы изучения механизмов органических реакций

- 6.1. Подходы к изучению механизмов реакций ароматических соединений
- 6.2. Кинетические исследования. Изотопный кинетический эффект

5. **Форма промежуточной аттестации:** зачет.

**Аннотация дисциплины
«Реакции формирования карбо- и гетероароматического базиса»**

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Органическая химия»

1. Дисциплина «Реакции формирования карбо- и гетероароматического базиса» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. **Целями** освоения дисциплины «Реакции формирования карбо- и гетероароматического базиса» являются формирование у аспирантов теоретического фундамента современного органического синтеза, самостоятельной работы с научно-технической литературой, расширение и закрепление базовых понятий органической химии, необходимых для дальнейшего изучения различных областей химии, развитие способности к творчеству, в том числе к научно-исследовательской работе, и выработка потребности к самостоятельному приобретению знаний.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

Тема 1. Классификация реагентов и реакций.

- 1.1. Основные функциональные группы. Классификация карбо- и гетероароматических соединений. Основы номенклатуры карбо- и гетероароматических соединений.
- 1.2. Типы органических реагентов, используемых в органическом синтезе. Классификация реакций.
- 1.3. Промежуточные частицы (интермедиаты): радикалы, карбокатионы, карбанионы, карбены, нитрены, арины и др

Тема 2. Реакции электрофильного замещения в ароматическом ряду.

- 2.1. Классификация реакций ароматического электрофильного замещения. Общие представления о механизме реакций, кинетический изотопный эффект в реакциях электрофильного замещения водорода в бензольном кольце.
- 2.2. Представление о π - и σ -комплексах. Структура переходного состояния. Арениевые ионы в реакциях электрофильного замещения.
- 2.3. Влияние природы заместителя на ориентацию и скорость реакции электрофильного замещения. Электронодонорные и электроноакцепторные заместители. Согласованная и несогласованная ориентация двух или нескольких заместителей в ароматическом кольце.
- 2.4. Кинетический и термодинамический контроль в реакции.

Тема 3. Реакции ароматического нуклеофильного замещения.

- 3.1. Классификация механизмов реакций ароматического нуклеофильного замещения.
- 3.2. Энергетический профиль реакций.
- 3.3. Метод межфазного переноса и его использование в органическом синтезе.
- 3.4. Нуклеофильное замещение атомов водорода. Окислительное, викариозное, кин- и телезамещение.

Тема 4. Реакции окисления карбо и гетероаренов.

- 4.1. Действие окислителей на карбо- и гетероарены.
- 4.2. Окисление бензола, нафталина, антрацена.
- 4.3. Окисление в боковой цепи аренов.

Тема 5. Реакции восстановления в ряду карбо и гетероаренов.

5.1. Действие восстановителей на карбо- и гетероарены.

5.2. Восстановление нитроаренов в кислой и щелочной среде. Промежуточные продукты восстановления нитрогруппы (нитрозосоединения, арилгидроксиламины, азокси-, азо- и гидразосоединения).

5.3. Восстановление Аренов по Берчу.

Тема 6. Реакции диазотирования первичных ароматических аминов

6.1. Реакции диазотирования первичных ароматических аминов. Условия диазотирования в зависимости от строения амина.

6.2. Механизм, природа нитрозирующего агента. Строение и устойчивость солей диазония.

6.3. Реакции диазосоединений с выделением азота: замена диазогруппы на гидроксил-, галоген-, циан-, нитрогруппу и водород.

6.4. Реакции диазосоединений без выделения азота: восстановление до арилгидразинов, азосочетание.

6.5. Азосочетание как реакция электрофильного замещения. Азо- и диазосоставляющие, условие сочетания с аминами и фенолами. Азокрасители.

5. **Форма промежуточной аттестации:** зачет.