

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения
Российской академии наук (ИНХ СО РАН)**

СОГЛАСОВАНО

Декан факультета естественных
наук НГУ, д.х.н., проф.

В.А. Резников

« ____ » _____ 2022 г.

УТВЕРЖДАЮ

Зам. директора ИНХ СО РАН,
д.х.н., проф.

С.В. Корнев

« ____ » _____ 2022 г.

**Основная образовательная программа
высшего профессионального образования**

Подготовка научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

по научным специальностям
1.4.1. – неорганическая химия
1.4.2. – аналитическая химия
1.4.4. – физическая химия

ФГТ утверждены приказом Минобрнауки России
от 20.10.2021 г. № 951

Нормативный срок освоения программы 4 года

Форма обучения очная

Новосибирск 2022

1. Общие положения

1.1. Определение

Основная образовательная программа высшего профессионального образования (ООП ВПО) является системой учебно-методических документов, сформированной на основе Федеральных государственных требований к структуре подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, условиями её реализации, сроком освоения программы.

Аспирантура ИНХ СО РАН готовит специалистов по следующим научным специальностям (далее – научные специальности):

1.4.1. – неорганическая химия. Неорганическая химия – раздел науки, изучающий строение, реакционную способность и свойства химических элементов и их соединений, за исключением органических соединений. Объектами исследований являются химические элементы и их соединения, включая координационные соединения с неорганическими, органическими и био лигандами и материалы на их основе. Теоретической основой неорганической химии является Периодический закон Д.И. Менделеева. Методы неорганической химии включают синтез неорганических соединений различными способами, изучение их строения, химических превращений и свойств физическими и физико-химическими методами.

1.4.2. – аналитическая химия. Аналитическая химия – наука об определении химического состава веществ и материалов, т.е. о методах и средствах химического анализа. Химический анализ делится на виды: элементный анализ, вещественный анализ, молекулярный анализ, изотопный анализ и в некоторых случаях – структурно-групповой анализ. Различают качественный анализ (идентификация) и количественный анализ. По природе анализируемого объекта различают анализ неорганических и органических веществ, а также веществ биологического происхождения. Аналитическая химия – научная дисциплина, включающая в себя многие разделы химии и физики, приборостроение, метрологию и информатику. Развитие этих наук в рамках аналитической химии направлено на выделение и количественное описание аналитического сигнала, с помощью которого определяют химический состав вещества.

1.4.4. – физическая химия. Физическая химия – раздел химической науки об общих законах, определяющих строение веществ, направление и скорость химических превращений при различных внешних условиях; о количественных взаимодействиях между химическим составом, структурой вещества и его свойствами. Теоретической основой физической химии являются общие законы физической науки. Она включает учение о строении молекул вещества, химическую термодинамику и химическую кинетику.

Освоение программы аспирантуры (адъюнктуры) осуществляется аспирантами по индивидуальному плану работы, включающему индивидуальный план научной деятельности и индивидуальный учебный план (далее вместе - индивидуальный план работы).

1.2. Цель разработки ООП ВПО по подготовке по научным специальностям

Целью разработки основной образовательной программы является обеспечение подготовки к защите кандидатской диссертации по научным специальностям 1.4.1. – неорганическая химия, 1.4.2. – аналитическая химия, 1.4.4. – физическая химия.

1.3. Срок освоения ООП и требования к поступающим

Для обучения по настоящей ООП в аспирантуру ИНХ СО РАН на конкурсной основе принимаются лица, имеющие диплом магистра или специалиста по одному из естественно-научных направлений (специальности), успешно выдержавшие вступительные испытания. Программа вступительного экзамена приведена в Приложении 1 к ООП.

Нормативный срок освоения ООП 4 года.

2. Структура программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

2.1. Научный компонент.

Научная деятельность аспиранта направлена на подготовку диссертации на соискание научной степени кандидата наук (далее – диссертация) к защите, подготовку публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации, в рецензируемых научных изданиях, в приравненных к ним научных изданиях в соответствии с рекомендацией Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, а также в научных изданиях, индексируемых в наукометрической базе данных Russian Science Citation Index (RSCI), и (или) заявок на патенты на изобретения, полезные модели, промышленные образцы, прохождение промежуточной аттестации по этапам научного исследования.

Научная деятельность осуществляется в течение 4 лет обучения. Два раза в год аспирант проходит промежуточную аттестацию, где оценивается результат его работы в соответствии с запланированными исследованиями.

Тема исследования может быть скорректирована в процессе подготовки диссертации.

К окончанию аспирантуры должно быть опубликовано не менее двух научных работ в рецензируемых научных изданиях в соответствии с рекомендацией Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, а также в научных изданиях, индексируемых в наукометрической базе данных Russian Science Citation Index (RSCI).

2.2. Образовательный компонент.

Образовательный компонент включает подготовку и сдачу кандидатских экзаменов по «Истории и философии науки», иностранному языку и специальности. Аспирант, при подготовке к сдаче кандидатского экзамена по специальности совместно с научным руководителем, имеет возможность выбрать и внести в индивидуальный учебный план спецкурсы, которые помогут при сдаче этого экзамена. Внесение выбранных дисциплин в индивидуальный план аспиранта обязывает аспиранта к их освоению.

2.3. Итоговая аттестация.

Итоговая аттестация по программам аспирантуры проводится в форме оценки диссертации на предмет ее соответствия [критериям](#), установленным в соответствии с Федеральным [законом](#) от 23 августа 1996 г. N 127-ФЗ "О науке и государственной научно-технической политике". Аттестация проводится комиссией, назначенной приказом директора Института после положительного заключения семинара Отдела.

2.4. Освоение программы аспирантуры инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

При освоении программы аспирантуры инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья срок освоения программы продлевается не более чем на один год.

2.5. Структура программы аспирантуры

	Наименование компонентов программы аспирантуры и их составляющих	Срок исполнения и (или) критерии реализации
	Научный компонент	
	Научная деятельность, направленная на подготовку диссертации	4 года, пред-

1	к защите	ставление к защите диссертации
2	Подготовка публикаций и (или) заявок на патенты на изобретения, полезные модели, промышленные образцы	2 и более публикации
3	Промежуточная аттестация по этапам выполнения научного исследования	2 раза в год
	Образовательный компонент	
1	1.1. История и философия науки 1.2. Иностранный язык 1.3. Спецкурсы по подготовке к сдаче кандидатского минимума по специальности (факультативно)	Сдача кандидатских экзаменов
2	Ознакомительная и (или) педагогическая практика	144 академических часа.
3	Промежуточная аттестация	
3.1	Кандидатский экзамен по «Истории и философии науки»	180 академических часов (зачёт и экзамен)
3.2	Кандидатский экзамен по иностранному языку	144 академических часа (зачёт и экзамен)
	Кандидатский экзамен по специальности.	1 раз за период обучения
	Итоговая аттестация	

3. Результат освоения программы аспирантуры

3.1. Результатом освоения программы аспирантуры является представление к защите кандидатской диссертации.

3.2. Выпускники аспирантуры по научной специальности 1.4.1 – неорганическая химия могут осуществлять научную деятельность, включающую следующие области и направления, но не ограничиваясь ими:

- Фундаментальные основы получения объектов исследования неорганической химии и материалов на их основе.

- Дизайн и синтез новых неорганических соединений и особо чистых веществ с заданными свойствами.

- Химическая связь и строение неорганических соединений.
 - Реакционная способность неорганических соединений в различных агрегатных состояниях и экстремальных условиях
 - Взаимосвязь между составом, строением и свойствами неорганических соединений.
- Неорганические наноструктурированные материалы.
- Определение надмолекулярного строения синтетических и природных неорганических соединений, включая координационные.
 - Процессы комплексообразования и реакционная способность координационных соединений, Реакции координированных лигандов.
 - Моделирование процессов, протекающих в окружающей среде, растениях и живых организмах, с участием объектов исследования неорганической химии.

3.3. Выпускники аспирантуры по научной специальности 1.4.2 – аналитическая химия могут осуществлять научную деятельность, включающую следующие области и направления, но не ограничиваясь ими:

- Теория методов аналитической химии.
- Методы химического анализа (химические, физико-химические, атомная и молекулярная спектроскопия, хроматография, рентгеновская спектроскопия, масс-спектрометрия, ядерно-физические методы и др).
- Аналитические приборы.
- Методическое обеспечение химического анализа.
- Математическое обеспечение химического анализа.
- Метрологическое обеспечение химического анализа.
- Теория и практика пробоотбора и пробоподготовки в аналитической химии.
- Методы маскирования, разделения и концентрирования.
- Анализ неорганических материалов и исходных продуктов для их получения.
- Анализ органических веществ и материалов.
- Анализ нефтехимической продукции.
- Анализ объектов окружающей среды.
- Анализ пищевых продуктов.
- Анализ природных веществ.
- Анализ лекарственных препаратов.
- Клинический анализ.
- Химический анализ в криминалистике.
- Аналитический контроль технологических процессов.
- Сертификация веществ и материалов по химическому составу.

3.4. Выпускники аспирантуры по научной специальности 1.4.4 – физическая химия могут осуществлять научную деятельность, включающую следующие области и направления, но не ограничиваясь ими:

- Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ.
- Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов.
- Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях.
- Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия.
- Изучение физико-химических свойств систем при воздействии внешних полей, а также в экстремальных условиях высоких температур и давлений.
- Неравновесные процессы, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах.

- Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация.
- Динамика элементарного акта при химических превращениях.
- Элементарные реакции с участием активных частиц.
- Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции.
- Физико-химические основы процессов химической технологии.

4. Компоненты, определяющие содержание и организацию образовательного процесса

Структура программы аспирантуры включает научный и образовательный компоненты.

4.1. Научный компонент включает в себя

Научная деятельность, направленная на подготовку диссертации к защите.

Подготовка публикаций и (или) заявок на патенты на изобретения, полезные модели, промышленные образцы.

Промежуточная аттестация по этапам выполнения научного исследования.

4.2. Образовательный компонент включает в себя подготовку и сдачу экзаменов кандидатского минимума, а именно, История и философия науки, иностранный язык и специальность (неорганическая, аналитическая или физическая химия), зачёты и экзамены, выбранные для подготовки к сдаче кандидатского экзамена по специальности и практику.

Дисциплины (модули) направленные на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по специальности выбираются научным руководителем и являются обязательными. Список дисциплин представлен в Приложении 1. Реализация этой части программы аспирантуры осуществляется на основе Соглашения о сетевой форме взаимодействия между Новосибирским государственным университетом и ИНХ СО РАН, после выбора аспирантом научной специальности и темы научно-исследовательской работы.

Программы дисциплин (модулей), направленных на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов, разрабатываются самостоятельно в соответствии с примерными программами, утверждаемыми Министерством образования и науки Российской Федерации.

Программа практики утверждается научным руководителем. Аспирант по выбору может пройти следующие виды практик: общая ознакомительная лабораторная практика (знакомство с различными методами синтеза и (или) характеристики веществ), педагогическая практика (руководство практикой студентов, работа в качестве преподавателя на кафедрах НГУ или других Вузов, в СУНЦ НГУ).

4.3. Итоговая аттестация.

5. Условия реализации программы аспирантуры в ИНХ СО РАН

5.1. Общесистемная реализация программы аспирантуры

5.1.1. Реализация программы аспирантуры в сетевой форме обеспечивается совокупностью ресурсов материально-технического и учебно-методического обеспечения, предоставляемого организациями, участвующими в реализации программы аспирантуры в сетевой форме.

5.1.2. Организации располагают материально-технической базой, соответствующей действующим противопожарным правилам и нормам и обеспечивающей проведение всех видов дисциплинарной и междисциплинарной подготовки, практической и научно-исследовательской работы аспирантов, предусмотренных учебным планом.

5.1.3. Общая площадь помещений организаций, осуществляющих сетевое обучение, составляет не менее 10 квадратных метров на одного обучающегося (в совокупности для обучающихся очной формы обучения).

5.1.4. Электронно-библиотечная система (электронная библиотека) и электронная информационно-образовательная среда обеспечивает возможность индивидуального доступа,

для каждого аспиранта из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет, как на территории образовательных организаций, так и вне их.

5.1.5. Организации обеспечены необходимым комплектом лицензионного программного обеспечения. В случае применения электронного обучения, дистанционных образовательных технологий обеспечен удаленный доступ к использованию программного обеспечения, либо предоставлены все необходимые лицензии обучающимся.

5.1.6. Квалификация руководящих и научно-педагогических работников организаций соответствует квалификационным характеристикам, установленным в Едином квалификационном справочнике должностей руководителей, специалистов и служащих, раздел «Квалификационные характеристики должностей руководителей и специалистов высшего профессионального и дополнительного профессионального образования»

5.1.7. Среднегодовой объем финансирования научных исследований на одного научно-педагогического работника (в приведенных к целочисленным значениям ставок) составляет величину не менее, чем величина аналогичного показателя мониторинга системы образования, утверждаемого Министерством образования и науки Российской Федерации¹.

5.2. Кадровые условия реализации программы аспирантуры по научным специальностям

5.2.1. Реализация программы аспирантуры обеспечивается руководящими и научно-педагогическими работниками организаций, а также лицами, привлекаемыми к реализации программы аспирантуры на условиях гражданско-правового договора.

5.2.2. Доля научно-педагогических работников (в приведенных к целочисленным значениям ставок), имеющих ученую степень (в том числе ученую степень, присвоенную за рубежом и признаваемую в Российской Федерации) и/или ученое звание (в том числе ученое звание, полученное за рубежом и признаваемое в Российской Федерации), в общем числе научно-педагогических работников, реализующих программу аспирантуры составляет не менее 75 процентов.

5.2.3. Научные руководители, назначаемые аспирантам имеют ученую степень (в том числе ученую степень, присвоенную за рубежом и признаваемую в Российской Федерации), осуществляют самостоятельную научно-исследовательскую (творческую) деятельность (участвуют в осуществлении такой деятельности) по профилю направления подготовки, имеют публикации по результатам указанной научно-исследовательской (творческой) деятельности в ведущих отечественных и (или) зарубежных рецензируемых научных журналах и изданиях, а также осуществляют апробацию результатов указанной научно-исследовательской (творческой) деятельности на национальных и международных конференциях.

5.3. Материально-техническое и учебно-методическое обеспечение программ аспирантуры по научным специальностям

5.3.1. Организации имеют специальные помещения для проведения лекционных занятий, практических (семинарских) занятий, помещения для самостоятельной работы и помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования. Помещения для проведения лекционных и практических (семинарских) занятий укомплектованы специализированной учебной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы аспирантов оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети Интернет.

Каждый аспирант в течение всего периода обучения обеспечивается индивидуальным неограниченным доступом к одной или нескольким электронно-библиотечным системам (электронным библиотекам), содержащим все обязательные и дополнительные издания учебной, учебно-методической и иной литературы, перечисленные в рабочих программах дисциплин (модулей), практик.

5.3.2. В случае применения электронного обучения, дистанционных образовательных технологий каждый аспирант в течение всего периода обучения, обеспечивается индивидуальным неограниченным доступом к электронной информационно-образовательной среде, содержащей все электронные образовательные ресурсы, перечисленные в рабочих программах дисциплин (модулей), практик, размещенные на основе прямых договорных отношений с правообладателями.

5.3.3. В случае неиспользования в организациях электронно-библиотечной системы (электронной библиотеки) библиотечный фонд должен быть укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 25 экземпляров каждого из изданий обязательной литературы, перечисленной в рабочих программах дисциплин (модулей), практик, и не менее 5 экземпляров дополнительной литературы на 100 аспирантов.

5.3.4. Электронно-библиотечная система (электронная библиотека) и электронная информационно-образовательная среда обеспечивают одновременный доступ не менее 25% аспирантов по программе аспирантуры.

5.3.5. Аспирантам и научно-педагогическим работникам обеспечивается доступ к современным профессиональным базам данных (в том числе международным реферативным базам данных научных изданий) и информационным справочным системам, состав которых определяется в рабочих программах дисциплин (модулей) и подлежит ежегодному обновлению.

5.3.6. Организации обладают всем необходимым для обеспечения обучения оборудованием.

6. Оценка качества освоения программы аспирантуры

6.1. Оценка качества освоения программы аспирантом включает промежуточную аттестацию обучающихся и итоговую аттестацию.

6.2. Качество освоения спецкурсов по программе обучения осуществляется посредством проведения экзаменационных испытаний с выдачей соответствующего удостоверения.

6.3. Объем и предмет практических занятий аспиранта определяется индивидуально научным руководителем для каждого обучающегося в соответствии со спецификой аспирантской работы. Оценка качества прохождения практических занятий зачетная. Зачёт фиксируется в Индивидуальном учебном плане аспиранта за подписью руководителя практики.

6.4. Педагогическая практика аспиранта может осуществляться в форме:

- руководство курсовой работой студента;
- руководство дипломной работой студента;
- проведение лабораторных и/или семинарских занятий на кафедрах НГУ или других

Вузов, в СУНЦ НГУ.

Объем педагогической практики аспиранта определяется индивидуально. Приказ о руководстве курсовой и/или дипломной работой студента является документом, подтверждающим прохождение педагогической практики. Преподавательская деятельность аспиранта подтверждается справкой с соответствующей кафедры.

6.5. Аспирантам предоставлена возможность оценки содержания, организации и качества образовательного процесса в целом и отдельных дисциплин (модулей) и практик, а также работы отдельных научно-педагогических работников.

6.6. Итоговая аттестация для аспирантов по программам аспирантуры определяет степень готовности диссертационной работы к защите и оформляется соответствующим Заключением.

7. Заключительные положения

7.1. Настоящая программа действует до принятия новой основной образовательной программы.

Список разработчиков ООП

Разработчики ООП:

Зам. декана Факультета естественных наук НГУ
д.х.н., доцент

В. А. Емельянов

Зав. аспирантурой ИНХ СО РАН
к.х.н.

И.В. Андриенко

Аннотации рабочих программ специальных дисциплин подготовки аспирантов в ИНХ СО РАН

Строение неорганических веществ

Основной целью освоения дисциплины является знакомство с современными теоретическими и экспериментальными методами изучения особенностей электронного строения неорганических веществ и материалов, знакомство с квантовохимическими методами описания электронной структуры молекул и комплексов и основными физическими методами изучения электронной структуры; методами интерпретации спектров ЯМР, ЭПР, УФ, ИК, КР, РФЭС, РС, EXAFS, XANES, Мессбауэровской спектроскопии. Основные задачи курса: изучение электронного строения многоэлектронных систем; изучение современных физических методов исследования электронного строения неорганических веществ; освоение методов интерпретации магниторезонансных, оптических, фотоэлектронных и рентгеновских спектров различных веществ и материалов.

Реакционная способность комплексных соединений

Основной целью освоения дисциплины является знакомство с различными факторами, влияющими на реакционную способность комплексных соединений. Основные задачи курса: изучение химической связи в комплексных соединениях, типов лигандов, координационных чисел и стереохимии, знакомство с факторами, влияющими на образование и стабильность комплексных соединений в растворах, изучение механизмов реакций замещения лигандов и о-в реакций, а также реакционной способности координированных лигандов.

Кластерные соединения

Основной целью освоения дисциплины является получение фундаментальных знаний по кластерным соединениям различного типа. Основные задачи курса: изучение классификации кластерных соединений по их нуклеарности и типу металлического остова (цепи, циклы, полиэдры); знакомство с электронным строением молекулярных кластерных соединений; изучение особенностей координации лигандов в металлокластерах, кристаллической и электронной структурой кластерных комплексов; знакомство с важнейшими физико-химическими свойствами и областями применения кластерных соединений.

Основы кристаллохимии

Основной целью освоения дисциплины является знакомство с основами структурной кристаллографии, рентгеноструктурного анализа и кристаллохимии. Задачи курса связаны с теоретическим и практическим усвоением: симметричного аппарата описания молекул, кристаллов и кристаллических структур; вопросов, связанных с экспериментальным определением кристаллических структур; основ общей, описательной и прикладной кристаллохимии; структурных особенностей различных классов химических соединений и вытекающих из них физико-химических свойств; структурного подхода к физико-химическим явлениям.

Гетерогенные равновесия

Основной целью освоения дисциплины является овладение методами физико-химического анализа, необходимыми при решении общехимических задач, связанных, в первую очередь, с разработкой методов синтеза веществ с заданными свойствами и определения их термодинамических и физико-химических свойств, поскольку диаграмма состояния является паспортом изучаемой системы для химика любой специализации. Для достижения поставленной цели выделяются следующие задачи курса: последовательное освоение фундаментальных основ теории гетерогенных равновесий в одно-, двух-, трех- и большей компонентности системах. При этом вопросы строения частных диаграмм состояния освещают-

ся с позиций необходимости знаний о строении более полных диаграмм состояния, учитывающих взаимосвязь основных параметров состояния: давление, температура, приведенный объем и состав.

Соединения включения

Основной целью курса является ознакомление с основами химии соединений включения, а также с основными понятиями супрамолекулярной химии. Задачи курса: знакомство с основными понятиями и терминами супрамолекулярной химии, теоретическими моделями клатратообразования; изучение различных классов клатратов: Клатраты гидрохинона, фенола и его замещенных. Соединения Дианина. Гексахозиян. Канальные (тубулато) клатраты. Клатраты Шеффера, Гофманна–Ивамото. Клатратные гидраты. Макромолекулярные, слоистые, мономолекулярные соединения включения. Циклодекстрины. Клатратокомплексы; знакомство с перспективами использования процессов клатратообразования и применения клатратных соединений.

Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии

Основной целью освоения дисциплины является знакомство с современными теоретическими и экспериментальными методами исследования строения неорганических веществ и материалов. Основные задачи курса: освоение расчетных и топологических квантовохимических и спектроскопических методов исследования различных веществ и материалов (ЯМР, ЭПР, ЯКР, ЯГР, UV-VIS, РС, ИК, КР, магнетохимия и метод дипольных молекул).

Избранные главы металлоорганической химии

Целью курса является ознакомление аспирантов с общими сведениями о химии металлоорганических соединений, их применении в смежных областях (катализ и материаловедение), а также биологическом действии. Основные задачи курса: изучение химии металлоорганических соединений непереходных металлов и f-элементов; знакомство с методами синтеза, свойствами и строением объектов, перспективных для создания катализаторов и получения пленочных материалов методом CVD.

Дополнительные главы аналитической химии

Основная цель курса состоит в том, чтобы расширить знания о конкретных процедурах анализа и аналитических реагентах. Курс состоит из двух частей. Первая посвящена аналитическим реагентам, вторая – некоторым физическим (в основном, спектральным) методам. Задачи 1 части курса – дать достаточно широкий набор сведений о конкретных аналитических реагентах, областях и особенностях их использования с акцентом на обоснование на базе физико-химических и других законов и обобщений. Небольшая часть курса посвящена обзору возможностей определения форм в лабильных системах. Задачи 2 части – сформировать представление об аналитических возможностях современных атомно-эмиссионных, атомно-абсорбционных, рентгено-спектральных и масс-спектрометрических методах элементного анализа неорганических веществ.

Основы химической метрологии

В курсе даются основные понятия математической статистики, термины, определения в приложении к предмету “аналитическая химия”. Рассматриваются типы распределений случайной величины (результата измерений, анализа) и их связь между собой; способы обработки результатов измерений, вычисления погрешностей химического анализа, метрологических характеристик методик химического анализа. Даются основные понятия методологии метрологического обеспечения деятельности аналитической лаборатории, аккредитации ее органами Госстандарта РФ.

Методы разделения и концентрирования

Основной целью курса является ознакомление с традиционными и новейшими методами разделения и концентрирования. Эти операции представляют собой неотъемлемую и важнейшую часть одной из основных стадий аналитического процесса – подготовки пробы. Основные задачи курса: изложение принципиальных теоретических основ различных классов методов разделения и концентрирования, в том числе методов, основанных на образова-

нии новой фазы и на различии в межфазном распределении, мембранных методов и методов внутрифазового распределения; анализ возможностей и ограничений перечисленных выше методов, а также выявление областей и объектов анализа, для которых эти методы могут быть использованы; специфические особенности рассматриваемых способов разделения и концентрирования и достигаемые в них метрологические показатели.

Современные методы хроматографического анализа

Цель курса – познакомить аспирантов с современными достижениями газовой хроматографии. Задачи курса – дать базовые понятия, связанные с теорией хроматографии, познакомить с принципами работы современных устройств, функционирование которых обеспечивает возможности газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии для решения различных аналитических задач. Курс содержит не только информационно-познавательный лекционный, но и учебно-тренинговый материал в виде практических семинарских занятий. Семинарские занятия включают в себя работу на современных хроматографических приборах (Цвет, Кристалл, Varian, Perkin-Elmer), оснащенных компьютерными системами обработки.

Физические методы установления строения органических соединений

Основной целью освоения дисциплины является получение систематизированных знаний о современных методах молекулярной спектроскопии, а также приобретения практических навыков использования методов ИК-, УФ-, ЯМР-спектроскопии и Масс-спектрометрии для установления строения органических соединений. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса, состоящие в овладении теоретических основ и практического использования каждого метода в отдельности, а также комплексного использования всех методов для точного установления строения неизвестного соединения.

Теоретические основы органической химии

В курсе излагаются фундаментальные положения теоретической органической химии, включая современные представления о строении и реакционной способности органических соединений, методологии установления механизмов органических реакций. Особое внимание уделено рассмотрению природы химической связи, связи свойств молекул с их орбитальной структурой, проблеме ароматичности, представлениям о взаимном влиянии атомов в молекулах, основным типам активных промежуточных частиц. Рассмотрены основные принципы и концепции органической химии: принципы "активность-селективность", наименьшего движения, линейности свободных энергий, сохранения орбитальной симметрии, концепция жестких и мягких кислот и оснований и др. Значительная часть курса посвящена рассмотрению механизмов органических реакций в свете указанных принципов.

Методология органического синтеза

Основной целью освоения дисциплины является выработка у аспиранта навыков ретросинтетического анализа и умение выбрать наиболее эффективные пути синтеза сложных органических молекул. Для достижения поставленной цели выделяются следующие основные задачи курса: на основе принципов синтонной технологии закладываются основы наиболее оптимальных путей виртуального разбиения молекул органических веществ на "составные блоки", при этом последовательно рассматривается переход от простых соединений к более сложным; первостепенное внимание уделяется методам управления селективностью органических реакций, включая основные принципы использования защитных групп; при рассмотрении синтетических методов органической химии во главу угла ставятся конструктивные реакции, в первую очередь, методы образования С-С связей, как основа сборки скелета органического соединения; особое внимание обращается на развитие новых методов и технологий современного органического синтеза, направленного на снижение неблагоприятных воздействий химических процессов на окружающую среду (внедрение т.н. принципов "зеленой химии").

Стереохимия органических соединений

Основной целью освоения курса является приобретение навыков использования современных теоретических и экспериментальных методов исследования, используемых для

установления пространственного строения органических молекул и анализа реакционной способности органических веществ. Для достижения поставленной цели даются сведения о базовых понятиях современной стереохимии, систематизированные знания об используемых в стереохимии физических, физико-химических и химических методах исследования, демонстрируются примеры решения сложных стереохимических задач. Для закрепления знаний и приобретения практических навыков предлагается самостоятельно разобрать ряд стереохимических задач и изложить логику разрешения возникающих при этом проблем.

Вычислительные методы в органической химии

Основной целью освоения курса «вычислительные методы в органической химии» является приобретение навыков использования современной вычислительной техники и программного обеспечения для решения исследовательских задач в химии. Для достижения поставленной цели даются сведения об общих принципах обработки информации с использованием компьютеров и компьютерных систем, о возможностях современных телекоммуникационных средств, о программных средствах, применяемых для решения разнообразных химических задач, обработки химической и физико-химической информации; демонстрируются примеры использования компьютеров в различных областях химических исследований. Для закрепления знаний и приобретения практических навыков предлагается самостоятельно освоить ряд специальных программ и с их помощью решить ряд постановочных задач и реальных проблем, возникающих в ходе собственных исследований, проводимых студентами при выполнении курсовых работ.

Ферменты в органическом синтезе

Основной целью освоения дисциплины является изучение основ инженерной энзимологии как раздела биотехнологии и ее связи с другими областями знаний (химия, молекулярная биология, экология, биохимия, физическая и органическая химия). Для достижения поставленной цели даются основные представления об использовании ферментов в синтезе органических соединений и возможностях их использования для решения конкретных синтетических задач. В курс включены разделы и темы, основанные на журнальных публикациях, посвященных применению ферментов в качестве каталитических агентов для осуществления промышленных технологических процессов, не вошедшие в учебники. В подобных случаях даются ссылки на оригинальные научные публикации и сайты в Интернете, где можно ознакомиться с соответствующими оригинальными статьями.

Биологически активные вещества живых организмов

При прохождении курса аспиранты получают углубленные знания о структурном разнообразии и основных группах продуцентов живых организмов (высших и низших животных и растений, грибов, бактерий и некоторых других), способах классификации этих вторичных метаболитов, о некоторых их химических, токсикологических и других свойствах, о месте локализации в организме и способах выделения, о биологической или физиологической функции, о практическом применении этих веществ или их синтетических аналогов. Курс опирается на знание основ органической химии и классов органических соединений и является дополнением к базовой дисциплине «Органическая химия» и к некоторым другим химическим дисциплинам («биохимия», «биоорганическая химия» и т.п.).

Радиационная химия

Цель курса – знакомство с физическими и химическими процессами, происходящими при поглощении веществом ионизирующего излучения. Задачи курса – дать аспирантам представления о технике радиационно-химических экспериментов, видах ионизирующего излучения, методах определения интенсивности и энергии излучения, процессах в жидкой, твердой и газообразной средах. Основу курса составляют следующие разделы: история открытия и развитие исследований по радиоактивности; физические процессы происходящие при прохождении ионизирующих частиц через вещество; первичные выходы электронов и возбужденных состояний; источники излучений; дозиметрия ионизирующего излучения; экспериментальные методы в радиационной химии; радиолиз конденсированной среды; пер-

вичные радиационно-химические процессы в газах; практические приложения радиационной химии.

Современные методы химической кинетики

Целью курса является знакомство с самыми современными физическими методами исследований кинетики быстрых химических реакций. Представлены струевые, статические, релаксационные и импульсные методы исследования. Среди них такие методы, как методы температурного скачка и скачка давления, метод электрического импульса, импульсный фотолиз и лазерный импульсный фотолиз. Рассмотрены многофотонные и многоквантовые процессы при высокой интенсивности света, малой длительности и высокой монохроматичности лазерного излучения. Особое внимание уделено использованию инфракрасных лазеров в химической кинетике, которые позволяют проводить многофотонную диссоциацию молекул, селективную по определенным химическим связям. Широко представлены люминесцентные методы в химической кинетике, которые используются для исследования процессов релаксации различных видов энергии, таких как колебательно-колебательная и колебательно-поступательная релаксации.

Фотохимия

Основной целью освоения дисциплины является приобретение знаний в области современных теорий фотохимии и подготовка специалистов, способных самостоятельно решать методологические проблемы при проведении фотохимических исследований. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: обучить аспирантов основным моделям, а также теоретическим и экспериментальным методам фотохимии. Одной из задач является воспитание у аспиранта аналитического подхода при постановке задач, интерпретации результатов, а также при конструировании установок для фотохимических исследований.

Экологическая химия атмосферных процессов

Основной целью освоения дисциплины является приобретение знаний в области химии тропосферы и стратосферы. Задачи курса: знакомство с основными сведениями о химических реакциях, протекающих в тропосфере и стратосфере, сведениями о распространении излучения, парниковом эффекте, о роли малых газовых составляющих, о роли озона и проблеме озонового слоя, а также о роли аэрозолей в атмосфере. Основные разделы курса: Основы химических процессов в фоновой и загрязненной атмосфере. Строение и газовый состав, распространение солнечного излучения в атмосфере, фотохимия малых газовых составляющих, парниковый эффект. Превращения оксидов азота и атмосферного аммиака, циклы задержки, а также превращения с участием органических соединений азота (ПАН, ППН). Фотохимические превращения озона, включая каталитические циклы разрушения. Роль галогенов в атмосфере и проблема озонной дыры. Роль ОН радикала в химических превращениях в атмосфере. Реакции восстановленных соединений серы и влияние органических сульфидов на глобальные изменения климата. Основные реакции цикла окисления метана и углеводородов, смогообразование. Основные представления о методах измерения концентраций аэрозольных частиц и роли гетерогенных процессов в атмосфере.

Введение в теорию химических реакций

Основной целью освоения дисциплины является приобретение знаний в области моделирования элементарного акта химических реакций и расчетов констант скоростей химических реакций. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса – дать основные представления о теориях элементарного химического акта в газовой фазе и о современных подходах в этой области: поверхности потенциальной энергии; статистические методы описания элементарного акта; теории мономолекулярного распада; процессы в столкновениях; введение в стохастические процессы

Расчетные методы квантовой химии

Основная цель курса – познакомить аспирантов с современными методами и приближениями квантовой химии. Основные разделы курса: адиабатическое и одноэлектронное приближения, мультипликативное представление многоэлектронных волновых функций и одноэлектронные уравнения с учетом усредненного поля электронов, метод самосогласован-

ного поля, вариационный метод, теория возмущений для невырожденных и вырожденных состояний. Природа химической связи и метод МО ЛКАО в многоатомных молекулах; метод функций плотности и средние значения одно- и двухэлектронных операторов гамильтониана. Широко представлены практические методы квантовой химии, которые включают уравнения самосогласованного поля, вариационный подход, вывод уравнений Хартри для двухэлектронных систем и уравнения Хартри-Фока, теоремы Купманса и Бриллюэна. Примеры расчета молекул с замкнутыми и открытыми электронными оболочками с использованием ограниченного и неограниченного методов Хартри-Фока. Полуэмпирические методы, методы полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием. Большое внимание уделяется методу орбиталей Хюккеля в р-электронном приближении для сопряженных углеводородов с учетом конфигурационного взаимодействия и электронной корреляции.

Кинетика жидкофазных реакций

Цель курса – познакомить аспирантов с кинетическими особенностями реакций в жидкой фазе. Задачи курса – дать аспирантам представления о влиянии растворителя на кинетику химических реакций и особенностях различных типов диффузионно-контролируемых и кинетически-контролируемых реакций. Курс содержит шесть разделов: диффузионно и кинетически-контролируемые реакции, структура жидкости; межмолекулярные взаимодействия, сольватация; диффузионно-контролируемые реакции; кинетически-контролируемые реакции; влияние давления на кинетику жидкофазных реакций; элементы квантовой теории химических реакций, перенос электрона

Кинетика процессов горения

Цель курса – ознакомить аспирантов с современным состоянием теории горения и прикладными аспектами этой дисциплины. Основными задачами курса являются усвоение базовых понятий теории горения, освещение современного состояния теории, установление взаимосвязи физических и химических процессов в явлении горения, характеристика современных направлений развития теории и эксперимента в этой области. Основу курса составляют традиционные разделы отечественных и зарубежных курсов теории горения. Новизна курса обусловлена включением в него новых разделов теории горения: фильтрационное горение, технологическое горение, основы пожаровзрывобезопасности пламен с избытком энергии.

Биоорганическая химия

Курс предназначен для исследования химических компонентов живой клетки, осуществляющих ее внутриклеточный гомеостаз и межклеточные взаимодействия, с использованием химических методов и подходов, в частности, с использованием молекулярных моделей, полученных синтетическим путем. Основной целью освоения дисциплины является донесение до аспирантов, именно с точки зрения химика, подходов, концепций, деталей и обобщений, направленных на решение проблемы нуклеиново-белковых и белок-белковых взаимодействий. Для достижения поставленной цели выделяется главная задача курса – показать, что все, что изучает биоорганическая химия – это химическая реакционноспособность разных уровней надмолекулярных структур.

Биотехнология

Основной целью освоения дисциплины является изучение основ биотехнологии и ее связи с другими областями знаний (химия, молекулярная биология, экология, биохимия, физическая и органическая химия). Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: формирование основных представлений о продуцентах, используемых в биотехнологии, способах их культивирования и управления процессами биосинтеза продуктов; ознакомление с существующими технологиями выделения и очистки продуктов биосинтеза, структуре и организации биотехнологического процесса и современных методах фракционирования сложных смесей компонентов биологического материала

Генетическая инженерия

Основной целью дисциплины является свободная ориентация аспирантов в проблематике генетической инженерии бактерий, дрожжей, животных и растений. Для достижения

этой цели выделяются задачи: информировать аспирантов об основных подходах и методических достижениях генетической инженерии; дать представления о молекулярных векторах различных систем клонирования генов; дать представления о методах создания суперпродуктов белков в прокариотических и эукариотических системах; ознакомить с подходами по созданию современных безопасных противовирусных вакцин методами генетической инженерии; дать представление о методах создания трансгенных животных и растений

Горячие точки молекулярной биологии

Основной целью курса является характеристика современного состояния исследований в наиболее актуальных областях молекулярной биологии и биохимии. Курс состоит из тематических фрагментов, которые читаются ведущими специалистами научно-исследовательских институтов СО РАН. Основные разделы курса следующие: современное состояние проблемы изучения экспрессии генов (новейшие данные о исследовании транскрипции, трансляции, репликации, репарации); геном человека (секвенирование нуклеиновых кислот, геномная дактилоскопия и диагностика, исследование структуры и функций генов); антисмысловые технологии (антисмысловые олигонуклеотиды, антисмысловые РНК, рибозимы); генная терапия и генная иммунизация; комбинаторные методы (олигонуклеотидные и пептидные библиотеки, аптамеры, каталитические нуклеиновые кислоты); современные проблемы ферментативного катализа (полимеразы нуклеиновых кислот, аминоацил-Т РНК синтаза, каталитические антитела).

Методы исследования биополимеров

Основной целью дисциплины является освоение знаний и подходов, необходимых для самостоятельного планирования экспериментов по фракционированию биополимеров и определению их основных характеристик, а также для самостоятельной интерпретации результатов таких экспериментов. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: изучение физико-химических закономерностей, лежащих в основе основных методов фракционирования и анализа биополимеров; изучение устройства и особенностей функционирования оборудования, используемого для этих целей; изучение реальных примеров экспериментов по фракционированию и анализу биополимеров.

Строение биополимеров

Основной целью освоения курса является привитие аспирантам навыка к восприятию биополимера как высокоорганизованной атомной конструкции в трехмерном пространстве, пониманию и интерпретации физико-химических свойств биополимеров в терминах современной структурной биологии, т.е. пространственного строения и конформационных превращений. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: изучение номенклатуры или языка структурного описания атомного строения основных классов биополимеров – белков и нуклеиновых кислот; изучение основных принципов атомного строения белков и нуклеиновых; изучение основных типов атом-атомных взаимодействий в биополимерах, обеспечивающих стабильность наблюдаемых пространственных структур; изучение основных принципов и методов теоретического моделирования структуры и конформационных превращений в биополимерах.

Физическая химия биополимеров

Основной целью освоения дисциплины является понимание кинетических и физико-химических принципов ферментативного катализа и строения и функций ферментов. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: освоение теоретических основ ферментативной кинетики и их применение для описания экспериментальных закономерностей ферментативных реакций любой сложности, а также для понимания строения и функций биокатализаторов.

Адсорбция и пористая структура

Основной целью курса является освоение современных представлений о текстуре и текстурологии пористых материалов, включая гетерогенные катализаторы, законах адсорбции, текстуре (супрамолекулярной структуре) пористых материалов, основных механизмах формирования текстуры и адсорбционных методах ее исследования. Для достижения по-

ставленной цели выделяются задачи курса: теория поверхностных явлений, включая теорию адсорбции и капиллярной конденсации; теория и практика применения адсорбционных методов для определения удельной поверхности, объема и распределения пор по размерам, включая микропоры с размером до 2 нм; теория строения пористых материалов, соотношения между основными текстурными характеристиками, методы моделирования текстуры; теория формирования текстуры пористых материалов, включая типовые гетерогенные катализаторы и их носители; традиционные и новые возможности использования адсорбционных явлений; историческое место адсорбции, теории пористых систем и катализа в общем развитии естествознания.

Кинетика гетерогенных каталитических реакций

Основной целью освоения курса является ознакомление аспирантов с основами формальной кинетики гетерогенных каталитических реакций и теорией процессов переноса. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса, заключающиеся в освоении следующих разделов: теория стационарных реакций; нестационарные кинетические модели; экспериментальные методы изучения кинетики; массо- и теплоперенос в химической кинетике; методы обработки кинетического эксперимента.

Инженерная химия каталитических процессов

Основная цель дисциплины - дать аспирантам представление об основах современного инженерного катализа. Для достижения поставленной цели выделяются следующие задачи: рассмотрение способов осуществления каталитических процессов в промышленности и типы каталитических реакторов; изучение кинетики каталитических реакций; анализ процессов в пористом зерне катализатора; математическое моделирование каталитических реакторов различных конструкций и методы их анализа; изучение основ гидродинамики и основ построения и анализа химико-технологических схем (ХТС) для осуществления каталитических процессов в промышленности; обзор современных промышленных каталитических процессов

Катализ

Основной целью освоения дисциплины является получение аспирантами теоретических знаний по катализу и адсорбции на современном уровне и во взаимосвязи с другими науками. Курс построен, основываясь на современной концепции единства явлений гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа. При феноменологическом описании явлений катализа излагаются основные причины возникновения каталитических эффектов, вводятся понятия активного центра катализатора и каталитического цикла. Рассматриваются формы промежуточных химических взаимодействий при катализе, явления химической активации веществ. Даются представления об особенностях каталитической активации веществ с участием газообразных, жидких и твердых катализаторов. Дальнейший курс построен на фактологическом описании принципов каталитического действия катализаторов разной природы: кислот и оснований, цеолитов, комплексов переходных металлов, твердых окислов, металлов, сульфидов металлов, твердых металлоорганических систем, кластеров металлов, некоторых металлоферментов. Даются сведения о механизмах протекания на этих катализаторах наиболее важных процессов: гидролиза, изомеризации, полного и частичного окисления, гидрирования, карбонилирования, полимеризации олефинов, восстановительной олигомеризации окиси углерода, синтеза аммиака, гидроочистки и реформинга, синтеза метанола, серной кислоты, и ряда других. Специальный раздел курса посвящен освещению вопросов предвидения каталитического действия, прогнозирования состава активных центров и методов их конструирования. Рассмотрены исторические этапы развития теоретических представлений в катализе, современные тенденции в развитии методов поиска катализаторов. Даются сведения о роли компьютерной техники в реализации этих подходов.

Катализ, окружающая среда и устойчивое развитие цивилизации

Основной целью освоения курса является ознакомление с общим значением катализа и каталитических технологий для мировой экономики и их влиянием на окружающую среду. Катализ как важнейший элемент устойчивого развития при смене сырьевой базы экономики.

Для достижения поставленной цели аспиранты изучают каталитические реакции в природе, в газопылевом облаке при образовании планет, в геологических процессах. Даются представления о природоохранных технологиях на основе каталитических процессов, о безотходных технологиях химической промышленности, о каталитических технологиях использования и переработки вторичного и техногенного сырья, об использовании катализа для решения энергетических проблем в системе устойчивого развития цивилизации.

Квантовые методы в катализе

Основной целью освоения дисциплины является получение основных представлений о квантово-химических методах расчета электронной структуры молекул вообще и каталитических систем, основанных на соединениях переходных металлов, в частности. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: получение основных представлений о теории Хартри-Фока и теории функционала плотности; получение представления о методах решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма в рамках приближения МОЛКАО (молекулярная орбиталь как линейная комбинация атомных орбиталей); приобретение практических навыков расчета простых молекул современными квантово-химическими методами.

Молекулярный дизайн катализаторов

Основной целью освоения курса является обучение подходам создания молекулярных моделей химических объектов с использованием структурных баз данных и программ молекулярного моделирования. Для достижения поставленной цели выделяются следующие задачи: ознакомление с основами создания молекулярных моделей химических систем для наиболее важных типов каталитических процессов; ознакомление с принципами построения программ молекулярного моделирования на примерах доступных программных комплексов; приобретение навыков работы со структурными базами данных; создание молекулярных моделей в рамках индивидуальных тем дипломных работ, выполняемых студентами, и проведение расчетов свойств химических систем с использованием этих моделей.

Научные основы приготовления катализаторов

Основной целью освоения дисциплины является получения знаний о современных теоретических и экспериментальных подходах целенаправленного синтеза катализаторов с заданным набором свойств и характеристик. Для достижения поставленной цели выделяются следующие задачи курса: ознакомление студентов с современными представлениями о научных основах приготовления катализаторов, как науке о синтезе пористых дисперсных материалов с заданными химическим и фазовым составом; получение знаний о способах получения дисперсных твердых тел; получение знаний об основных традиционных методах приготовления катализаторов и современных теоретических подходах, положенных в основу каждого конкретного метода приготовления.

Применение ЭВМ в каталитических исследованиях

Основной целью освоения курса является овладение практическими знаниями и умениями эффективного использования современных средств и методов компьютерных технологий для решения научно-исследовательских задач. Для достижения поставленной цели выделяются следующие задачи: устройство персонального компьютера, принципы работы компьютерных сетей и операционных систем, протоколы Интернет; основы организации файловых систем и основы взаимодействия компьютеров в сети; квалифицированная работа с электронными текстами, Интернет-ресурсами; возможности табличных процессоров для анализа, обработки и представления информации.

Современная техника каталитического эксперимента

Основной целью освоения дисциплины является развитие у аспирантов устойчивых навыков высокоточных экспериментальных исследований каталитических свойств гетерогенных катализаторов. Для достижения поставленной цели выделяются следующие задачи: ознакомление с понятием «каталитическая активность»; ознакомление с методами определений каталитической активности; ознакомление с экспериментальной техникой для определений каталитической активности; ознакомление с оптимальными алгоритмами решения типовых кинетических задач; проведение серии экспериментальных кинетических исследований

на специализированной учебной каталитической установке на примере модельного одно-маршрутного стационарного каталитического процесса полного окисления метана молекулярным кислородом воздуха с использованием специального катализатора.

Термодинамика функционирующего катализатора

Основной целью освоения курса является освоение методологии описания состояния функционирующего катализатора и его реконструкции под действием реакционной среды в зависимости от термодинамических параметров, описывающих катализатор и реагенты. Для достижения поставленной цели выделяются задачи углубленного анализа стационарного состояния катализатора в ходе протекания каталитической реакции.

Кинетика гетерогенных реакций

Основная цель – знакомство с теоретическими представлениями и развитие практических навыков анализа кинетики различных типов гетерогенных твердофазных процессов. В программе представлены следующие разделы: методы описания кинетики топохимических реакций, основанные на геометрических подходах и на представлении о независимости процессов зарождения и роста зародышей новой фазы продукта реакции; границы применимости известных кинетических моделей; особое внимание уделено проблеме корректного выбора модели и однозначности определения скоростей реакций; отдельная глава посвящена анализу зависимости скорости реакции от давления и температуры и связанных с этим ошибок в определении энергии активации обратимых реакций. Вторая часть курса ориентирована на твердофазные реакции, контролируемые диффузией. В заключительной части курса рассматриваются кинетические подходы к анализу кинетики твердофазных реакций, протекающих в условиях импульсной активации (механохимической, радиационно-термической). Показаны источники методической погрешности, связанные со специфическими условиями эксперимента, которые необходимо учитывать при корректном кинетическом описании

Методы кристаллоструктурных исследований

Основной целью курса является получение аспирантами знаний о дифракционных методах исследования кристаллических структур, овладение навыками обработки данных, полученных с дифрактометров, с использованием современного компьютерного программного обеспечения, овладение навыками работы со структурными базами данных. В программе представлены следующие разделы: способы представления и описания кристаллических структур; использование Международных таблиц по кристаллографии для “расшифровки” структурной информации, содержащейся в публикациях и в базах структурных данных; разные форматы представления структурной информации; использование компьютерных программ для визуализации и анализа известных кристаллических структур; практическое знакомство с работой программы PowderCell; знакомство с описанием кристаллических и некристаллических структур на основе метода Вороного-Делоне; анализ распределения свободного пространства в структуре; практические занятия по работе с Кембриджским банком структурных данных; сравнительный анализ частоты встречаемости кристаллических структур, относящихся к различным пространственным группам симметрии; анализ распределения структур по структурным классам; интерпретация полученных результатов; анализ геометрических параметров выделенного фрагмента; методика анализа специфических контактов и нековалентных взаимодействий в структурах; поиск водородных связей различных типов, контактов галоген-галоген, контактов халькоген-халькоген, контактов металл-металл и др.; статистический анализ геометрических параметров, характеризующих данные вид контактов и взаимодействий; анализ роли определенных межмолекулярных контактов в формировании кристаллических структур.

Термический анализ

Основной целью курса является получение знаний об областях применения термического анализа (качественный и количественный анализ материалов, исследование термостимулированных процессов в твердом теле и химических реакций), овладение некоторыми практическими навыками при планировании термоаналитического эксперимента и обработке экспериментальных данных. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса:

изучение теории теплоёмкости и термического расширения твёрдых тел; современные представления о кинетике реакций разложения и дегидратации; знакомство с принципами работы термоаналитических приборов, с реализацией этих принципов в конкретных приборах фирмы «NETZSCH»; обучение навыкам обработки и интерпретации результатов термоаналитических измерений.

Физико-химическая механика и механохимия

Цель курса – знакомство с методами и основными понятиями физико-химической механики и механохимии. В программе представлены такие разделы, как: особенности механохимических превращений и «парадоксы» механохимических реакций; типы дисперсных систем и классификация дисперсных систем по размеру частиц. Уравнение Лапласа и капиллярные эффекты; уравнение Томсона (Кельвина), пересыщение и зародышеобразование; методы термодинамического описания поверхностного слоя. Когезия и адгезия; строение двойного электрического слоя; модели упругого, вязкого и пластичного твердого тела; развитие деформации во времени для различных механических моделей, описывающих твердые и жидкие тела; роль поверхностно-активных веществ в деформации и разрушении твердых тел и диспергировании жидкостей; физические процессы при механической обработке твердых тел; механохимические реакции в неорганических системах, полимерах, ковалентных твердых телах; механохимические реакции твердое + жидкость, твердое + твердое. Механохимические реакции и механическая активация твердых тел, сходство и различие; мельницы, активаторы и другие устройства, предназначенные для механической обработки твердых тел, суспензий, паст, эмульсий.

Хемометрика

Основной целью освоения курса является получение аспирантами знаний о наиболее распространенных математических методах анализа экспериментальных данных в области химии, овладение некоторыми практическими навыками при обработке экспериментальных данных. Задачи курса: знакомство с базовыми математическими методами анализа данных, обучение работе со специализированным компьютерным программным обеспечением. Курс включает в себя краткий теоретический материал и задания, выполняемые с использованием современного компьютерного программного обеспечения по анализу данных.

Химия поверхности

Основная цель – дать теоретические представления о процессах на поверхности и границах раздела, о современных основах высоких технологий: микро-, наноэлектроники и микросистемной техники, представление о методах изучения поверхностных процессов. В программе представлены следующие разделы: процессы, определяемые явлениями на поверхности твердых тел; общая характеристика свойств поверхности твердых тел. Методы исследования поверхностных и адсорбционных процессов; основы термодинамического рассмотрения поверхностных явлений. Кристаллохимия поверхности металлов; поверхностная самодиффузия; элементы теории роста кристаллов; испарение кристаллов; характеристика взаимодействий в системе адсорбат-твердое тело; кинетика простейших реакций на поверхности твердых тел; Закономерности процесса окисления металлов; элементы теории поверхности полупроводников; проблемы химии поверхности твердых тел.

Физические методы исследования твердых тел

Основной целью освоения курса является ознакомление с основными физическими методами, используемыми при проведении научно-исследовательских работ в области химии твердого тела. В программе представлены следующие разделы: электрофизические методы, проводимость, диэлектрическая спектроскопия; ИК- и КР-спектроскопия, особенности применения для изучения твердых веществ; термический анализ, ТГ, ДТА, ДТГ; калориметрия; резонансные методы: ЯМР твердых веществ, ЭПР, ЯГР, двойной резонанс; оптическая спектроскопия, люминесценция, в том числе в условиях высоких давлений.

Введение в физические свойства твердых тел

Основная цель курса - дать представление о факторах, определяющих механические, диэлектрические, магнитные и оптические свойства твердых тел. В программе представлены

следующие разделы: понятие физического свойства; свойства, существующие для индивидуальных молекул; свойства, существующие для ансамблей молекул; свойства, существующие для кристаллов; связь симметрии физического свойства и симметрии кристаллической структуры; свойства, характеризующие изменения в кристалле при изменении температуры, давления, воздействии света, электрического и магнитного полей, механические свойства твердых тел; влияние на свойства кристаллов идеальной структуры и наличия дефектов, свойства поликристаллических образцов; свойства наносистем, различия понятий "кристалл" и "материал", методы прогнозирования свойств, дизайн новых материалов.

Колебательная спектроскопия твердых тел

Цели курса заключается в углубленном знакомстве аспирантов с современными колебательными методами исследования строения вещества. В задачи курса входит освоение фундаментальных основ методов ИК- и КР-спектроскопии и приобретение практических навыков их использования в научно-исследовательской работе.

Использование синхротронного излучения в дифракционных исследованиях

Курс ставит своей целью усвоение аспирантами понятий и навыков, связанных с применением синхротронного излучения для проведения структурных исследований, необходимых при проведении исследований в области химии твердого тела, материаловедения и смежных с ними дисциплин. В первой части данный курс знакомит аспирантов, уже обладающих представлением об основных методах рентгеноструктурного, с синхротронным излучением: историей его открытия, основными свойствами и источниками его получения. Значительное внимание уделяется вспомогательным устройствам, устанавливаемым на каналах синхротронного излучения: монохроматорам, коллиматорам, аттенюаторам, мониторам положения пучка излучения. Дальнейшим шагом становится знакомство с различными системами детектирования синхротронного излучения: ионизационными камерами, сцинтилляционными, полупроводниковыми, одно- и двух-координатными детекторами. Во второй части рассматриваются различные методы и методики рентгеноструктурного анализа, применяемые в исследованиях с использованием синхротронного излучения. К ним относятся дифрактометрия высокого разрешения, аномальное и диффузное рассеяние, дифрактометрия с высоким временным разрешением, энергодисперсионная дифрактометрия. Параллельно с изучением методик даются примеры использования данных методик для проведения исследований в области химии твердого тела.

Химия атмосферы

Цель курса – познакомить аспирантов с химическими процессами, протекающими в атмосфере. Задачи курса – дать базовые понятия, характеризующие состояние, взаимодействие и эволюцию основных биогеохимических циклов в условиях функционирования системы земля – атмосфера – солнечное излучение; охарактеризовать основные каналы процессов ввода и вывода веществ из атмосферы. Основу курса составляют разделы, связанные с изучением проблем образования загрязняющих атмосферу веществ, которые включают как естественные, так и антропогенные источники, механизмы поступления их в атмосферу, выявляется определяющая роль солнечного излучения в механизмах вывода загрязнений из атмосферы.

Экологическая гидрохимия

Основной целью освоения дисциплины является ознакомление с современными подходами и методами химико-экологических исследований природных вод в их естественном и нарушенном состоянии. Задачи курса: приобретение теоретических знаний об эволюции химического состава гидросферы, ее современной структуре, факторах формирования состава вод атмосферы, поверхностных, подземных, океанических вод, проблемах их загрязнения, нормирования и контроля; ознакомление с современными методами оценки состояния веществ в природных водах; приобретение практических навыков химико-экологических исследований природных вод. Особенность курса – системный подход к описанию химических превращений в природных водах с учетом роли биотических факторов формирования химического состава природных вод, что позволяет, с одной стороны, отразить прямые и обрат-

ные связи в системе организмы – окружающая среда, с другой – более конструктивно использовать достижения химии для характеристики состояния вещества и его изменений в природных водах.

Экологическая практика

Основная цель практики – закрепление знаний и понятий теоретических курсов гидрхимии и гидробиологии, освоение методических приемов изучения гидробиоценозов с целью оценки их экологического состояния и степени загрязнения. Основной задачей является практическое знакомство с жизненными формами гидробионтов (планктон, бентос, перифитон, нейстон, нектон); с чертами и особенностями организации и функционирования гидробиоценозов водоемов разной степени трофности и сапробности; с влиянием гидрофизических и гидрохимических параметров, включая загрязнение водоемов, на качественные и количественные характеристики гидробионтов и гидробиоценозов.

Гидробиология

Основная цель курса – формирование у аспирантов знаний и понятий об основных закономерностях организации и функционирования водных экосистем Земли. Задачи курса: формирование общих понятий о пресных и морских водоемах Земли, особенностях физических и химических свойств воды как среды обитания гидробионтов; формирование знаний и понятий о жизненных формах гидробионтов (планктон, бентос, перифитон, нейстон, нектон); формирование знаний и понятий об основных чертах экологии гидробионтов в зависимости от физических и химических условий их обитания; формирование знаний и понятий о роли гидробионтов во внутриводоемных процессах, в устойчивости водных экосистем.

Экологическая биохимия

Основной целью освоения дисциплины является изучение биохимических механизмов адаптации живых организмов к меняющимся условиям внешней среды. Задачи курса: изучение механизмов взаимодействия растений с внешней средой через вторичные метаболиты; изучение основных механизмы адаптации через изменение активности ферментов; рассмотрение метаболизм экзогенных и эндогенных соединений ферментами 1-й и 2-й фаз метаболизма ксенобиотиков как основу адаптации к чужеродным соединениям. Курс включает 3 раздела: биохимические основы взаимодействия живых организмов; адаптивное изменение биохимических процессов; адаптационные процессы взаимодействия живых организмов с химическими факторами внешней среды.

Аналитическая химия природных объектов

Цель курса – обучить аспирантов современным методам многопараметрического элементного и вещественного анализа объектов окружающей среды. Задачи курса – сформировать представление о методах характеристики химического состава природных объектов с позиции оценки экологической ситуации, дать практические навыки работы на современном оборудовании для анализа, обеспечить возможность применения полученных знаний для исследований в рамках реальной экологической проблемы. Основу курса составляют разделы инструментального анализа, применяемые в практике экологических исследований. В данном курсе акцент сделан на представление современных методов, отвечающих мировому уровню. Курс служит основой для формирования обоснованного подхода к методологии исследований и последующего его применения для решения экологических задач по изучению временной и пространственной динамики загрязнений от антропогенных источников различных типов. Курс включает лекционную и практическую часть. Аспирантам предлагается также самостоятельное изучение рекомендуемой литературы. Практические занятия включают в себя выполнение заданий по анализу реальных объектов окружающей среды

Геохимия

Основной целью освоения дисциплины является ознакомление аспирантов с современными подходами и методами геохимических исследований. Задачи курса: приобретение теоретических знаний в области физико-химического анализа, как инструмента геохимических исследований, знакомство с основами планетарной геологии, изучение основ геохимии элементов, процессов и систем, геохимии техногенеза и экологической геохимии. Курс

включает 5 разделов: основные понятия геохимии; геохимия процессов: общие вопросы; геохимия эндогенных процессов; геохимия экзогенных процессов; геохимия систем и элементов.

Экологическая физиология

Цель курса – сформировать у аспирантов представление о функционировании организма как целостной системы. Задачи курса – дать базовые представления о гомеостазе и рассмотреть основные функции организма с точки зрения их роли в поддержании основных параметров гомеостаза; охарактеризовать роль управляющих систем и особенности управления на разных уровнях организации; рассмотреть особенности осуществления функций в условиях взаимодействия с окружающей средой. Курс включает 5 разделов: процессы возбуждения и особенности возбудимых тканей; кровь и кровообращение; основные принципы регуляции и структурно-биохимические основы поддержания гомеостаза; системы, обеспечивающие обмен веществами и энергией с внешней средой (дыхание, пищеварение, выделение); поддержание гомеостаза.

Общая экология

Основной целью освоения дисциплины является получение и творческое освоение аспирантами систематизированных экологических знаний и терминологии, формирование умения использовать их в своей научно-исследовательской работе. Задачи курса: дать основные понятия о взаимодействии живых систем с окружающей средой на уровне особи, популяции, экосистемы и биосферы в целом; охарактеризовать основные процессы в надорганизменных живых системах, происхождение этих систем, их развитие и разнообразие; сформировать понимание роли человека в биосфере. В рамках курса даются базовые знания по структуре, функционированию, историческому развитию экосистем, влиянию на них человеческой деятельности; рассматриваются основные понятия, принципы и категории экологии. На лекциях рассматриваются основные этапы истории экосистем Земли, наиболее распространенные ныне существующие типы экосистем, основные типы антропогенного воздействия на экосистемы, разбираются системы уровня ниже экосистемы (особь, популяция, сообщество).

Химия почв

Основной целью освоения курса является формирование навыков для теоретических обобщений и разработок оптимальных решений прикладных задач в рамках химии окружающей среды, а также активного их использования в своей научно-исследовательской работе. Задачи курса связаны с теоретическим и практическим усвоением: представлений о сложности химического состава почв, специфики процессов и химических реакциях, происходящих в почве с участием ее минеральных и органических составляющих, а также новых методологических подходов к изучению химического состояния почв; вопросов, связанных с реализацией почвой своих глобальных и экосистемных функций, зависимых от химического состава и свойств почв; основ причин и последствий нарушений химического состава и свойств почв при антропогенном воздействии; принципов, методов и критериев оценки степени воздействия различных экзогенных химических соединений на почвы и основ почвенно-химического мониторинга; вопросов, связанных с химическим загрязнением и охраной почв. В рамках курса даются базовые знания по теоретическим основам химии почв, рассматриваются основные понятия, принципы и методы химии почв, дается интерпретация основных химических процессов и закономерностей. На лекциях разбираются наиболее важные и распространенные проблемы специфичности явлений, процессов и компонентов в химии почв, важнейшие структурные особенности минеральных, органических и органо-минеральных составляющих, а также обусловленность специфичности экологическими условиями формирования почв.

Экономика природопользования

Курс имеет целью выработку системного представления о взаимодействии окружающей природной среды и социально-экономической сфер жизни человека, проблемах этого взаимодействия и способах разрешения как с точки зрения категорий экономической теории,

так и практики управления природопользованием в России и за рубежом. Программа курса предлагает междисциплинарный подход в представлении дисциплины, включая и производственно-технологические аспекты экономики природопользования. Наличие системы экономического, социального, политического знания тем более важно, что объем знаний слушателей не предусматривает наличие систематических знаний в данных областях. В программе курса развит методологический блок на основе современной экономической теории и ее методов.

Экологическое право

Основной целью освоения курса является знакомство с основными институтами экологического права, включающими экологическую функцию государства, эколого-правовой статус человека, право собственности на природные объекты и ресурсы, право общего и специального природопользования, экологическое нормирование и стандартизацию, управление в среде охраны окружающей среды и природопользования, экологический контроль, экологическую экспертизу, правовой статус экологически неблагоприятных и особо охраняемых территорий, лицензионно-договорные основы специального природопользования, юридическую ответственность, экономико-правовой механизм природопользования и охраны окружающей среды.

Экологическая микробиология

Основной целью освоения курса является формирование представлений о месте микроорганизмов в биосфере, их роли в кругообороте веществ, особенностях биохимии микроорганизмов, возможности их использования в качестве технологических агентов для снижения негативных последствий антропогенных воздействий на окружающую среду, возможностях создания технологий общества устойчивого развития с использованием микроорганизмов. Задачи курса: формирование основных представлений об организации биосферы, «доменах жизни», микроорганизмах и их сообществах как компонентах биосферы, особенностях метаболизма микроорганизмов, их роли в возникновении и преобразованиях органического вещества в природе, о процессах обмена энергией между органической и неорганической природой; формирование базовых представлений о возможностях использования микроорганизмов в процессах биоремедиации территорий, пострадавших от антропогенных факторов, о возможности детоксикации вредных отходов производства и построения технологий, предотвращающих образование токсичных отходов. В курс включены разделы и темы, основанные на журнальных публикациях, посвященных современным методам исследования структуры микробных сообществ, таксономического отнесения микроорганизмов на основе анализа структуры генетического аппарата, технологиях защиты окружающей среды, основанных на использовании микроорганизмов и производимых ими продуктах.

Токсикология

Основной целью курса является ознакомление аспирантов с представлениями об основных составляющих токсичности – воздействием, пребыванием токсикантов в организме, механизмами токсичности, а также представлениями о современных подходах в оценке риска неблагоприятных последствий воздействия токсикантов на здоровье. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: охарактеризовать основные факторы токсического воздействия - токсические агенты, их классификация; частота, продолжительность, доза, связь дозы с эффектом. Эффект, виды токсических эффектов, вариабельность эффекта; рассмотреть этапы пребывания токсиканта в организме (абсорбция, распределение, воздействие на мишень, биотрансформация, экскреция/реабсорбция); рассмотреть механизмы первичного взаимодействия токсиканта с мишенью как основу токсических эффектов, проследить разветвление основных событий вслед за первичным взаимодействием во времени; ознакомиться с основными показателями количественного описания кинетики токсиканта в организме (клиренс и др.); ознакомить с оценками риска токсических эффектов лабораторными и эпидемиологическими подходами.

Математическое моделирование экосистем

Основная цель курса - знакомство с основными приемами и методами моделирования динамики экологических систем, выявления закономерностей и определения последствий при тех или иных воздействиях на экосистемы. В качестве основных детально рассматриваются модели Мальтуса, Гомпертца, Ферхюльста, Базыкина, Моргана-Риккера, Хассела, Скеллама и другие. При рассмотрении базовых моделей особое внимание уделяется вопросам изменения типа динамики численности, возникновению осцилляторных режимов и хаоса при изменении значений популяционных показателей и параметров внешней среды. Отдельно в курсе рассматриваются проблемы описания динамики взаимодействия двух различных видов: система хищник–жертва (модели Лотки–Вольтера, Костицына, Лесли, Алексеева–Базыкина, Колмогорова, Ресциньо–Ридчардсона, Розенцвейга–МакАртура), система ресурс–потребитель, конкуренция двух видов, симбиоза и т.д. (модели Лотки–Вольтера, Гаузе–Витта). При анализе взаимодействия популяции с их естественными врагами рассматривается математическая монофакторная теория популяционных взрывов, включающая следующие основные разделы: этапы формирования теории, феноменологическая теория Исаева–Хлебопруса, классификация типов вспышек массовых размножений и типов динамики численности популяций. Третью часть курса составляет математическая теория стабильности экологических систем, которая включает анализ существующих в литературе оценок стабильности, разнообразия и эластичности экосистем (меры Фишера, Шеннона и их модификации, критерий Хутсона–Виккерса и др.); связи различных оценок в рамках различных параметрических моделей взаимодействия двух видов.

Математическое моделирование переноса и трансформации веществ

Курс ставит своей целью усвоение аспирантами понятий, связанных с разработкой и применением методов математического моделирования для изучения природных процессов, в частности, для решения задач переноса и трансформации загрязняющих примесей в областях различных пространственных и временных масштабов с учетом реальных физико-географических условий регионов. Основу курса составляют следующие вопросы: общие понятия математического моделирования для решения научных и практических задач; описание исследуемых процессов в терминах моделей математической физики и химии на базе обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных; формулировка математических постановок задач, описание краевых и начальных условий, источников естественного и антропогенного происхождения; построение дискретных аналогов математических моделей; принципы организации численных методов для задач атмосферной химии и охраны окружающей среды; разработка алгоритмов для практической реализации моделей на ЭВМ; анализ результатов численных экспериментов, выполненных на базе математических моделей. В практической части курса даются навыки использования методов математического моделирования для решения задач охраны окружающей среды.

Экологическая экспертиза

Цели и задачи курса – дать аспирантам общетеоретические знания сложившихся правовых, нормативных и институциональных основ экологической экспертизы и экологической оценки в России и других странах мира. Представить современное состояние и тенденции развития научно-прикладных знаний в этой области, профессионально подготовить учащихся для осознанного и эффективного участия в процедурах ОВОС и экологической экспертизы. В итоге обучаемые должны понимать реальные правовые условия, возможности, права и обязанности всех участников процедур ОВОС и экспертизы. В рамках курса значительное место уделяется изучению основ управления охраной окружающей среды в РФ. При изучении законодательной и нормативной правовой базы в области экологической экспертизы и оценки воздействия намечаемой хозяйственной и иной деятельности в Российской Федерации, а также процедур экспертизы и ОВОС рассматриваются и международные аспекты развития экологической оценки, Директивы ЕС. Изучение процедур экспертизы и ОВОС происходит с использованием практических примеров намечаемой хозяйственной и иной деятельности в Новосибирской области и других субъектах РФ.

Бионеорганическая химия

Цель курса - с общими сведениями о бионеорганической химии, роли переходных металлов в живых организмах, механизмах действия металлсодержащих ферментов, а также о значении координационных соединений как модельных объектов и биологически активных соединениях. В курсе рассматриваются биологическая роль железа, цинка, меди, марганца, кобальта, молибдена. Разбираются процессы переноса электронов, переноса кислорода, активации азота, гидролиза. Даются представления о роли координационных соединений в медицине