



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

И.А. Кузнецова

2021 года

Аннотация дисциплины «История и философия науки»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая 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.
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 созерца-

тельной 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. Внутродисциплинарные 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.Атфильд).

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 открытости 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 четвёртого 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 идёт 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) «Физическая 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 послелогоми, предлогами с уточнителями. Многозначность и синонимия союзов, 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) «Физическая химия»

1. Дисциплина «Педагогика и психология высшей школы» относится к обязательным дисциплинам вариативной части блока Б1.

2. Цели освоения дисциплины

Основной целью освоения дисциплины «Педагогика и психология 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 «Стилистика научной речи»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая 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) «Физическая 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
«Электронное обучение и дистанционные образовательные технологии»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая 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 и использование образовательных ресурсов в среде Moodle. WebTutor – возможности применения.

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

Аннотация дисциплины «Физическая химия»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая химия»

1. Дисциплина «Физическая химия» относится к обязательным дисциплинам вариативной части блока Б1.
2. Целью освоения дисциплины «Физическая химия» является формирование у обучающихся представлений об основных понятиях и законах таких областей физической химии как строение вещества, химическая термодинамика, химическая кинетика.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.
4. Содержание дисциплины:

I. Строение вещества

1. Основы классической теории химического строения. Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.

2. Физические основы учения о строении молекул. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.

Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.

Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.

Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой.

Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.

Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.

Электронная корреляция в атомах и молекулах. Её проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия.

Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.

3. Симметрия молекулярных систем. Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, σ - и π -орбитали. π -Электронное приближение.

Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.

4. Электрические и магнитные свойства. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.

Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.

5. Межмолекулярные взаимодействия. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.

6. Основные результаты и закономерности в строении молекул. Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

7. Строение конденсированных фаз. Структурная классификация конденсированных фаз.

Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры.

Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.

Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры.

Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз.

Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.

Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов.

Мицеллообразование и строение мицелл.

Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).

8. Поверхность конденсированных фаз. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей, структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

II. Химическая термодинамика

Основные понятия и законы термодинамики

1. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, интенсивные и экстенсивные переменные. Уравнения состояния. Теорема о соответственных состояниях. Вириальные уравнения состояния.

2. Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Стандартные состояния и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Формула Кирхгоффа. Таблицы стандартных термодинамических величин и их использование в термодинамических расчетах.

3. Второй закон термодинамики. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах. Теорема Карно – Клаузиуса. Различные шкалы температур.

Фундаментальные уравнения Гиббса. Характеристические функции. Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Уравнения Максвелла. Условия равновесия и критерии самопроизвольного протекания процессов.

Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химического процесса. Химические потенциалы.

4. Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и её использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил. Полные потенциалы.

Элементы статистической термодинамики

5. Микро- и макросостояния химических систем. Фазовые Г- и μ -пространства. Эргодическая гипотеза. Термодинамическая вероятность и её связь с энтропией. Распределение Максвелла – Больцмана.

Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении.

Каноническая функция распределения Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии. Постулат Планка и абсолютная энтропия.

Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Составляющие внутренней энергии, теплоёмкости и энтропии, обусловленные поступательным, вращательным и колебательным движением.

Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа.

Распределения Бозе – Эйнштейна и Ферми – Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Уровень Ферми. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла, теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты. Вычисление сумм по состояниям для кристаллов с различными точечными дефектами. Нестехиометрические соединения и их термодинамическое описание.

Элементы термодинамики необратимых процессов

6. Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации. Потoki и силы. Скорость производства энтропии. Зависимость скорости производства энтропии от обобщенных потоков и сил. Соотношения взаимности Онсагера. Стационарное состояние системы и теорема Пригожина.

Термодиффузия и её описание в неравновесной термодинамике. Уравнение Чепмена – Энского.

Растворы. Фазовые равновесия

7. Различные типы растворов. Способы выражения состава растворов. Идеальные растворы, общее условие идеальности растворов. Давление насыщенного пара жидких растворов, закон Рауля. Неидеальные растворы и их свойства. Метод активностей. Коэффициенты активности и их определение.

Стандартные состояния при определении химических потенциалов компонент растворов. Симметричная и несимметричная системы отсчета.

Коллигативные свойства растворов. Изменение температуры замерзания растворов, криоскопия. Зонная плавка. Осмотические явления. Парциальные молярные величины, их определение для бинарных систем. Уравнение Гиббса – Дюгема.

Функция смешения для идеальных и неидеальных растворов. Предельно разбавленные растворы, атермальные и регулярные растворы, их свойства.

8. Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса.

Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния воды, серы, фосфора и углерода. Фазовые переходы первого рода. Уравнение Клапейрона – Клаузиуса.

Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем. Равновесие жидкость – пар в двухкомпонентных системах. Законы Гиббса – Коновалова. Азеотропные смеси.

Фазовые переходы второго рода. Уравнения Эренфеста.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса. Диаграммы плавкости трехкомпонентных систем.

Адсорбция и поверхностные явления

9. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная адсорбция. Динамический характер адсорбционного равновесия.

Изотермы и изобары адсорбции. Уравнение Генри. Константа адсорбционного равновесия. Уравнение Ленгмюра. Адсорбция из растворов. Уравнение Брунауэра – Эмета – Теллера (БЭТ) для полимолекулярной адсорбции. Определение площади поверхности адсорбента.

Хроматография, различные её типы (газовая, жидкостная, противоточная и др.).

10. Поверхность раздела фаз. Свободная поверхностная энергия, поверхностное натяжение, избыточные термодинамические функции поверхностного слоя. Изменение поверхностного натяжения на границе жидкость – пар в зависимости от температуры. Связь свободной поверхностной энергии с теплотой сублимации (правило Стефана), модулем упругости и другими свойствами вещества.

Эффект Ребиндера: изменение прочности и пластичности твердых тел вследствие снижения их поверхностной энергии.

Капиллярные явления. Зависимость давления пара от кривизны поверхности жидкости. Капиллярная конденсация. Зависимость растворимости от кривизны поверхности растворяющихся частиц (закон Гиббса – Оствальда – Фрейндлиха).

Электрохимические процессы

11. Растворы электролитов. Ион-дипольное взаимодействие, как основной процесс, определяющий устойчивость растворов электролитов. Коэффициенты активности в растворах электролитов. Средняя активность и средний коэффициент активности, их связь с активностью отдельных ионов. Основные положения теории Дебая – Хюккеля. Потенциал ионной атмосферы.

Условия электрохимического равновесия на границе раздела фаз и в электрохимической цепи. Термодинамика гальванического элемента. Электродвижущая сила, её выражение через энергию Гиббса реакции в элементе. Уравнения Нернста и Гиббса – Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. Определение коэффициентов активности на основе измерений ЭДС гальванического элемента.

Электропроводность растворов электролитов; удельная и эквивалентная электропроводность. Числа переноса, подвижность ионов и закон Кольрауша. Электрофоретический и релаксационные эффекты.

III. Кинетика химических реакций

Химическая кинетика

1. Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы опре-

деления скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции. Реакции переменного порядка.

2. Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение. Метод Боденштейна – Тёмкина. Кинетика гомогенных каталитических и ферментативных реакций. Уравнение Михаэлиса – Ментен.

Цепные реакции. Кинетика неразветвленных и разветвленных цепных реакций. Кинетические особенности разветвленных цепных реакций. Предельные явления в разветвленных цепных реакциях. Полуостров воспламенения, период индукции. Тепловой взрыв.

Реакции в потоке. Реакции идеального вытеснения и идеального смешения. Колебательные реакции.

3. Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Кинетика гетерогенных каталитических реакций. Различные режимы протекания реакций (кинетическая и внешняя кинетическая области, области внешней и внутренней диффузии).

4. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации и способы её определения.

5. Элементарные акты химических реакций и физический смысл энергии активации. Термический и нетермические пути активации молекул. Обмен энергией (поступательной, вращательной и колебательной) при столкновениях молекул. Время релаксации в молекулярных системах.

Теория активных столкновений. Сечение химических реакций. Формула Траутца – Льюиса. Расчет предэкспоненциального множителя по молекулярным постоянным. Стерический фактор.

Теория переходного состояния (активированного комплекса). Поверхность потенциальной энергии. Путь и координата реакции. Статистический расчет константы скорости. Энергия и энтропия активации. Использование молекулярных постоянных при расчете константы скорости.

6. Различные типы химических реакций. Мономолекулярные реакции в газах, схема Линдемана – Христиансена. Теория РРКМ. Бимолекулярные и тримолекулярные реакции, зависимость предэкспоненциального множителя от температуры.

Реакции в растворах, влияние растворителя и заряда реагирующих частиц. Клеточный эффект и сольватация.

Фотохимические и радиационнохимические реакции. Элементарные фотохимические процессы. Эксимеры и эксиплексы. Изменение физических и химических свойств молекул при электронном возбуждении. Квантовый выход. Закон Эйнштейна – Штарка.

7. Электрохимические реакции. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя. Теория Гуи – Чапмена – Грэма.

Электрокаплярные явления, уравнение Липпмана.

Скорость и стадии электродного процесса. Поляризация электродов. Полярография. Ток обмена и перенапряжение. Зависимость скорости стадии разряда от строения двойного слоя.

Химические источники тока, их виды. Электрохимическая коррозия. Методы защиты от коррозии.

Катализ

8. Классификация каталитических реакций и катализаторов. Теория промежуточных соединений в катализе, принцип энергетического соответствия.

9. Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа. Уравнение Брэнстеда. Корреляционные уравнения для энергий активации и теплот реакций. Специфический и общий основной катализ. Нуклеофильный и электрофильный катализ.

Катализ металлокомплексными соединениями. Гомогенные реакции гидрирования, их кинетика и механизмы.

10. Ферментативный катализ. Адсорбционные и каталитические центры ферментов. Активность и субстратная селективность ферментов. Коферменты. Механизмы ферментативного катализа.

11. Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Удельная и атомная активность. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

Современные теории функционирования гетерогенных катализаторов.

Основные промышленные каталитические процессы.

5. Форма промежуточной аттестации: кандидатский экзамен.

Аннотация дисциплины «Физическая органическая химия»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая химия»

1. Дисциплина «Физическая органическая химия» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. Целями освоения дисциплины «Физическая органическая химия» являются формирование у студентов представлений о применимости теорий, концепций и методов физической химии для описания структуры органических соединений и анализа их реакционной способности.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

1. Кинетика органических реакций

- 1.1. Введение. Предмет физической органической химии.
- 1.2. Методы исследования кинетики органических реакций.
- 1.3. Термодинамический и кинетический контроль реакций.
- 1.4. Интермедиаты органических реакций.

2. Количественные соотношения «строение – реакционная способность».

- 2.1. Принцип линейности свободных энергий.
- 2.2. Уравнение Гаммета. Нормальные константы заместителей. Константы σ^+ и σ^- .
- 2.3. Индуктивный и резонансный эффекты. Суммарное влияние нескольких заместителей. Орто-эффект.
- 2.4. Уравнение Тафта.
- 2.5. Изокинетическая зависимость. Изознтальпийные и изоэнтропийные реакционные серии.

3. Теории кислот и оснований.

- 3.1. Кислоты по Бренстеду и Льюису. Теория жестких и мягких кислот и оснований.
- 3.2. Функция кислотности H_0 . Функция избыточной кислотности X .
- 3.3. Константы кислотности различных классов органических соединений.
- 3.4. Общий кислотный и общий основной катализ. Каталитическое уравнение Бренстеда.
- 3.5. Механизмы кислотного и основного катализа органических реакций.

4. Квантово-химические концепции реакционной способности органических соединений.

- 4.1. Метод МО ЛКАО. Метод Хюккеля. Правило ароматичности.
- 4.2. Статический и динамический методы оценки реакционной способности. Индексы реакционной способности.
- 4.3. Зарядовый и орбитальный контроль. Концепции реакционной способности в рамках теории функционала плотности.
- 4.4. Правило сохранения орбитальной симметрии в химических реакциях (правило Вудворда-Хоффмана). Корреляционные диаграммы синхронных реакций.

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

Аннотация дисциплины
«Методы исследования механизма химических реакций»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая химия»

1. Дисциплина «Методы исследования механизма химических реакций» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. Целями освоения дисциплины «Методы исследования механизма химических реакций» являются формирование у обучающихся системы знаний и представлений о различных методах исследования кинетики и установления механизма химических реакций с применением современного аналитического оборудования.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

1. Продукты химической реакции и ее механизм.

Стабильные продукты и механизм реакции. Активные промежуточные частицы и способы их идентификации. Стереохимия и механизм реакции. Применение изотопов в химической кинетике.

Кинетика медленной реакции. Методы исследования кинетики газофазных и жидкофазных реакций. Химические и инструментальные методы контроля за протеканием реакции.

2. Методы исследования механизма цепных реакций.

Метод акцепторов свободных радикалов. Изучение распада инициаторов на радикалы. Кинетические методы исследования ингибиторов окисления. Метод смещения пределов цепного воспламенения. Методы изучения гомогенно-гетерогенных реакций.

Методы исследования механизма окисления органических соединений. Типы реакторов для проведения жидкофазного окисления. Кинетический и диффузионный режимы окисления.

Газометрические методы изучения реакций окисления. Изучение кинетики реакций окисления методом хемилюминесценции. Методы исследования кинетики накопления продуктов окисления. Кинетические методы изучения макроскопического механизма реакций окисления. Применение метода стационарных концентраций к процессу окисления органических соединений.

Методы измерения скоростей образования свободных радикалов при жидкофазном окислении. Методы измерения параметров окисляемости органических соединений. Методы изучения элементарных реакций пероксидных радикалов при жидкофазном окислении. Методы идентификации радикалов, образующихся в жидкофазном окислении.

3. Методы исследования быстрых реакций.

Метод конкурирующих реакций. Методы остановки реакции. Проведение реакций при низких температурах. Струевые методы. Постоянная, ускоренная и остановленная струи.

Метод фотохимического преддействия и последствия. Секторный метод (метод прерывистого освещения). Флуоресцентный метод.

Импульсные методы. Импульсный фотолиз. Лазерный фотолиз. Импульсная спектроскопия. Импульсный радиолиз. Элементарные процессы при облучении электронами. Релаксационные методы.

Спектроскопические методы исследования быстрых реакций. Метод ЯМР. Метод ЭПР. Лазерный магнитный резонанс. Кинетическая резонансно-флуоресцентная спектроскопия.

4. Неизотермические методы исследования кинетики.

Адиабатическое сжатие газа. Тепловой взрыв как метод неизотермической кинетики. Горение. Определение кинетического уравнения по кинетическим кривым разогрева. Термографический метод. Другие неизотермические методы.

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

**Аннотация дисциплины
«Кинетика гомолитических жидкофазных реакций»**

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая химия»

1. Дисциплина «Кинетика гомолитических жидкофазных реакций» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. Целями освоения дисциплины «Кинетика гомолитических жидкофазных реакций» являются формирование у студентов системы знаний и навыков, необходимых для изучения закономерностей протекания радикальных реакций во времени и установления эмпирической связи между скоростью радикальной реакции и условиями ее проведения; выявления механизма радикальных и радикально-цепных процессов; изучения элементарных реакций образования и превращение атомов, радикалов, ионов, ион-радикалов и т.д; изучения связи между строением соединений и их реакционной способностью в радикальных реакциях отрыва и присоединения.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

1. Свободные радикалы.

- 1.1. Введение. Открытие свободных радикалов.
- 1.2. Пространственная структура радикалов.
- 1.3. Энергии диссоциации связей и энтальпии образования радикалов
- 1.4. Магнитные свойства свободных радикалов. Масс-спектрометрия свободных радикалов.
- 1.5. Генерирование свободных радикалов: термическое, фотохимическое, радиационно-химическое инициирование, генерирование атомов и радикалов терморазрядом, окислительно-восстановительные реакции.

2. Специфика жидкофазных радикальных реакций.

- 2.1. Особенности жидкого состояния вещества. Кинетическая теория жидкости
- 2.2. Клеточный эффект. Влияние давления на скорость реакции в жидкости.
- 2.3. Теория столкновений в жидкости.
- 2.4. Теория переходного состояния.
- 2.5. Диффузионно-контролируемые реакции. Рекомбинация и диспропорционирование радикалов. Импульсные методы изучения быстрых реакций

3. Реакции свободных радикалов.

- 3.1. Мономолекулярные реакции. Изомеризация, сопровождающаяся отрывом атома водорода. Изомеризация с перемещением группы. Изомеризация с циклизацией и раскрытием цикла. Изомеризация непредельных соединений. Распад свободных радикалов.
- 3.2. Реакции радикального отрыва. Реакции замещения. Реакции бирадикалов.
- 3.3. Линейные корреляции в радикальной химии
- 3.4. Параболическая модель бимолекулярной радикальной реакции. Триpletное отталкивание. Стерический и полярный фактор. Мультидипольное взаимодействие.
- 3.5. Реакции радикального присоединения. Энтальпия и энтропия реакции. Параболическая модель реакции. Триpletное отталкивание в реакции присоединения. Взаимодействие полярных групп.
- 3.6. Окислительно-восстановительные реакции с образованием и участием свободных радикалов. Теоретические модели реакций переноса электрона. Реакции ионов с молекулами. Реакции ионов с атомами и радикалами. Реакции анион-радикалов.

4. Цепные реакции.

- 4.1. Цепные неразветвленные реакции. Условия реализации цепной реакции. Стадии цепной неразветвленной реакции. Кинетические закономерности цепной неразветвленной реакции.
- 4.2. Радикальная полимеризация. Механизм и кинетика. Передача цепи. Кинетика ингибированной полимеризации.
- 4.3. Окисление полимеров. Специфика протекания радикальных реакций в полимере. Миграция свободной валентности в полимере. Кинетика окисления полимеров. Диффузионный режим окисления полимеров. Окислительная деструкция полимеров.
- 4.4. Цепные разветвленные реакции. Теория цепной разветвленной реакции. Горение водорода. Цепные реакции с энергетическим разветвлением цепей. Реакция водорода со фтором. Химические лазеры на основе цепных реакций

5. Форма промежуточной аттестации: зачет.

Аннотация дисциплины «Ингибирование цепных реакций»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая химия»

1. Дисциплина «Ингибирование цепных реакций» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. Целями освоения дисциплины «Ингибирование цепных реакций» являются формирование у обучающихся представлений об общих принципах ингибирования, закономерностях и механизмах действия ингибиторов, применении ингибиторов в химической технологии.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

1. Основные положения теории цепных реакций

Сравнение молекулярных и радикальных реакций. Условия реализации цепной реакции. Принцип неуничтожимости свободной валентности. Принцип цикличности радикальных стадий. Условие приоритетности реакций продолжения цепи. Генерирование свободных радикалов.

Стадии цепной неразветвленной реакции. Длина цепи. Лимитирующая стадия продолжения цепи. Кинетические закономерности цепной неразветвленной реакции. Квазистационарный режим. Особенности протекания цепных реакций в газовой и жидкой фазах.

Принципы, лежащие в основе ингибирования цепных реакций. Кинетические характеристики ингибиторов цепных реакций.

2. Механизмы ингибирования цепных процессов

Ингибирование газофазных неразветвленно-цепных процессов. Кинетические особенности неразветвленно-цепных процессов в присутствии ингибиторов. Ингибирование процессов хлорирования водорода, органических соединений и оксида углерода. Ингибирование реакций распада.

Ингибиторы радикальной полимеризации. Кинетика ингибированной полимеризации. Самоингибирование радикальной полимеризации. Ингибирование полимеризации на глубоких стадиях.

3. Ингибированное окисление органических соединений

Цепной механизм окисления органических соединений. Кинетические закономерности цепного окисления.

Кинетическая классификация ингибиторов окисления. Емкость, сила и эффективность ингибиторов окисления. Базовые механизмы ингибированного окисления углеводородов.

Фенолы как ингибиторы окисления. Реакции феноксильных радикалов. Ароматические амины как ингибиторы окисления. Реакции аминильных радикалов. Влияние среды на активность ингибиторов.

Каталитический и многократный обрыв цепей окисления. Восстановительная активность оксипероксильных радикалов. Многократный обрыв цепей на нитроксильных радикалах и ароматических аминах. Многократный обрыв цепей в окисляющихся углеводородах и полимерах.

Ингибирование вырождено-разветвленных реакций окисления. Синергизм действия ингибиторов окисления.

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

Аннотация дисциплины

«Квантово-химическое и компьютерное моделирование в химической кинетике»

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая химия»

1. Дисциплина «Квантово-химическое и компьютерное моделирование в химической кинетике» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. Целями освоения дисциплины «Квантово-химическое и компьютерное моделирование в химической кинетике» являются формирование у обучающихся представлений об основных приемах компьютерного моделирования кинетики сложных химических процессов, методах решения прямой и обратной кинетических задач, способах предсказания реакционной способности химических соединений и установления ее связи со строением веществ.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

1. Введение. Основы численного моделирования кинетики химических процессов.

- 1.1. Основы формальной кинетики сложных химических процессов.
- 1.2. Приближенные методы химической кинетики. Метод квазистационарных концентраций.
- 1.3. Методы решения жестких систем линейных однородных дифференциальных уравнений. Методы Рунге-Кутты и Гира.
- 1.4. Влияние параметров численного интегрирования на сходимость и точность решения.
- 1.5. Численное решение прямой кинетической задачи для простых реакций. Сравнение решений аналитическими и численными методами для простых реакций.

2. Численное решение прямой кинетической задачи.

- 2.1. Моделирование неразветвленной цепной реакции полимеризации.
- 2.2. Моделирование неразветвленной цепной реакции окисления.
- 2.3. Моделирование реакции ингибированного окисления.
- 2.4. Моделирование вырождено-разветвленной цепной реакции окисления.
- 2.5. Моделирование разветвленной цепной реакции горения водорода.

3. Решение обратной кинетической задачи методом компьютерного моделирования

- 3.1. Понятие обратной кинетической задачи.
- 3.2. Способы решения обратной кинетической задачи: метод подбора и метод наименьших квадратов. Факторы, влияющие на сходимость решения и скорость нахождения минимума отклонений.
- 3.3. Использование весовых факторов для отдельных стадий химического процесса при решении обратной кинетической задачи.

4. Методы квантовой химии в химической кинетике.

- 4.1. Методы расчета структуры переходных состояний.
- 4.2. Индексы реакционной способности в химической кинетике. Расчет индексов реакционной способности методами квантовой химии.
- 4.3. Расчет констант скоростей химических реакций статистическими методами.

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

**Аннотация дисциплины
«Химия свободных радикалов»**

Направление 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) «Физическая химия»

1. Дисциплина «Химия свободных радикалов» относится к дисциплинам по выбору вариативной части блока Б1.
2. Целями освоения дисциплины «Химия свободных радикалов» являются формирование у аспирантов представлений о строении и свойствах свободных радикалов, а также основных закономерностей химических процессов с участием свободных радикалов.
3. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.
4. Содержание дисциплины:

1. Введение. Современные представления химии радикалов.

- 1.1. Введение. История открытия свободных радикалов.
- 1.2. Открытие атомарного водорода. Открытие алкильных радикалов.
- 1.3. Современные представления химии радикалов.
- 1.4. Общие методы получения радикалов.

2. Пространственная структура и физические свойства свободных радикалов.

- 2.1. Алкильные и циклоалкильные радикалы.
- 2.2. Бициклоалкильные и мостиковые радикалы.
- 2.3. Аллильные и винильные радикалы.
- 2.4. Гетерорадикалы: силильные, азотсодержащие и фосфорсодержащие.
- 2.5. Атомный магнетизм и магнитная восприимчивость свободных радикалов.

3. Реакции атомов и свободных радикалов в газовой фазе и растворе.

- 3.1. Реакции атомарного водорода и кислорода.
- 3.2. Реакции атомарных галогенов. Галогенирование углеводородов.
- 3.3. Реакции атомарного натрия.
- 3.4. Реакции рекомбинации и диспропорционирования алкильных радикалов.
- 3.5. Реакции присоединения алкильных радикалов.
- 3.6. Реакции отщепления алкильными радикалами.
- 3.7. Радикальные реакции окисления и восстановления.
- 3.8. Реакции свободных арильных радикалов.
- 3.9. Реакции гетерорадикалов.

4. Свободные радикалы как катализаторы. Реакции свободных радикалов с металлами.

- 4.1. Реакции, инициируемые атомами галогенов.
- 4.2. Перекиси как катализаторы.
- 4.3. Реакции радикалов на поверхности металлов.
- 4.4. Электродные реакции с участием радикалов.

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