

## 4.4 Аннотации рабочих программ дисциплин

### 4.4.1 Дисциплины обязательной части (базовая часть)

#### Аннотация рабочей программы дисциплины «Философские проблемы науки и техники» (Б1.Б.01)

**1. Цель дисциплины** – понимание актуальных философских и методологических проблем науки и техники. Дисциплина направлена на то, чтобы сформулировать представления о динамике и структуре современного состояния технического и химико-технологического знания; о закономерностях и тенденциях становления междисциплинарного единства химических, технических, химико-технологических, естественнонаучных и гуманитарных наук; об основных логико-методологических принципах и основах философско-методологического анализа технического и химико-технологического знания; о системе научных методов высоких технологий, химического измерения и инновационных подходов для выполнения научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (НИОКР) в технике и химической технологии.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК) компетенциями:

- способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);
- способностью совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, получать знания в области современных проблем науки, техники и технологии, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-4).

*Знать:*

- основные научные школы, направления, парадигмы, концепции в философии техники и химической технологии;
- философско-методологические основы научно-технических и инженерно-технологических проблем;
- развитие техники и химических технологий в соответствии со становлением доиндустриального, индустриального, постиндустриального периодов развития мира.

*Уметь:*

- применять в НИОКР категории философии техники и химических технологий;
- анализировать приоритетные направления техники и химических технологий;
- логически понимать и использовать достижение научно-технического прогресса и глобальных проблем цивилизации, практически использовать принципы, нормы и правила экологической, научно-технической, компьютерной этики;
- критически анализировать роль технического и химико-технологического знания при решении экологических проблем безопасности техники и химических технологий.

*Владеть:*

- основными понятиями философии техники и химической технологии;
- навыками анализа философских проблем техники, научно-технического знания и инженерной деятельности;
- способами критического анализа техники и ее инновационных методов научного исследования, поиска оптимальных решений НИОКР в технике и химической технологии;
- приемами публичных выступлений в полемике, дискуссии по философским проблемам техники и технического знания.

#### **3. Краткое содержание дисциплины**

*Модуль 1. Место техники и технических наук в культуре цивилизации.*

Философия техники, ее предмет и проблемное поле. Философия техники в современном обществе, ее функции.

Предмет философии техники: техника как объект и как деятельность. Философия техники: предмет и проблемное поле. Три аспекта техники: инженерный, антропологический и социальный. Техника как специфическая форма культуры. Исторические социокультурные предпосылки выделения технической проблематики и формирования философии техники: формирование

механистической картины мира, научно-техническая революция, научно-технический прогресс и стремительное развитие технологий после Второй мировой войны.

*Модуль 2. Техника и наука в их взаимоотношении.*

Техника и наука как способы самореализации сущностных сил и возможностей человека. Наука и техника. Соотношение науки и техники: линейная и эволюционная модели. Три стадии развития взаимоотношений науки и техники. Институциональная и когнитивная дифференциация сфер науки и техники и формирование технической ориентации в науке (XVII – XVIII вв.). Начало сциентификации техники и интенсивное развитие техники в период промышленной революции (конец XVIII – первая половина XIX в.). Систематический взаимообмен и взаимовлияние науки и техники (вторая половина XIX – XX в.). Становление и развитие технических наук классического, неклассического и пост неклассического типов

Возникновение инженерии как профессии основные исторические этапы развития инженерной деятельности. Технические науки и методология научно-технической деятельности.

*Модуль 3. Основные методологические подходы к пониманию сущности техники.*

Основные философские концепции техники. Антропологический подход: техника как органопроекция (Э. Капп, А. Гелен). Экзистенциалистский анализ техники (М. Хайдеггер, К. Ясперс, Х. Ортега-и-Гассет). Анализ технических наук и проектирования (П. Энгельмейер, Ф. Дессауэр). Исследование социальных функций и влияний техники; теория технократии и техногенной цивилизации (Ж. Элльоль, Л. Мэмфорд, Франкфуртская школа). Х. Сколимовски: философия техники как философия человека. Философия техники и идеи индивидуации Ж. Симондона. Взаимоотношения философско-культурологического и инженерно-технократического направлений в философии техники.

Основные проблемы современной философии техники. Социология и методология проектирования и инженерной деятельности. Соотношение дескриптивных и нормативных теорий в науке о конструировании. Кибернетика и моделирование технических систем Этика и ответственность инженера-техника: распределение и мера ответственности за техногенный экологический ущерб. Психосоциальное воздействие техники и этика управления.

Высокие технологии, химическое измерение и инновационные подходы для выполнения НИОКР в химии и химической технологии.

**4. Объем учебной дисциплины**

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>144</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,4</b>	<b>51</b>
Лекции (Лек)	0,5	16
Практические занятия (ПЗ)	0,9	35
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,6</b>	<b>57</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,4</b>	<b>38,25</b>
Лекции (Лек)	0,5	12,00
Практические занятия (ПЗ)	0,9	26,25
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,6</b>	<b>42,75</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

**1. Цель дисциплины** – получение знаний обучающимися об основных теоретических и экспериментальных методах исследования электронной структуры молекул и механизмов химических реакций, усвоение физических основ, принципов и границ применимости этих методов, а также формирование на основе полученных знаний практических навыков и их использование в профессиональной деятельности.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК) и общепрофессиональными (ОПК) компетенциями:

- способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);
- готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3);
- способностью совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, получать знания в области современных проблем науки, техники и технологии, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-4);
- способностью к профессиональному росту, к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности (ОК-5);
- способностью на практике использовать умения и навыки в организации исследовательских и проектных работ, в управлении коллективом (ОК-7);
- способностью находить творческие решения социальных и профессиональных задач, готовностью к принятию нестандартных решений (ОК-8);
- готовностью использовать методы математического моделирования материалов и технологических процессов, готовностью к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез (ОПК-4).

*Знать:*

- экспериментальные методы исследования электронной структуры молекул и механизмов химических реакций;
- основные квантово-механические методы, используемые для расчета физико-химических свойств веществ и прогнозирования путей химических превращений, границы их применимости и используемые приближения;
- принципы и условия применения теоретических и экспериментальных методов на практике.

*Уметь:*

- анализировать результаты квантово-химических расчетов молекул, проводить на их основе расчет параметров электронной структуры и индексов реакционной способности;
- применять качественные методы теории молекулярных орбиталей и представления о симметрии для оценки электронной структуры и реакционной способности соединений, а также интерпретации спектральных характеристик;
- проводить экспериментальные исследования по заданной методике, применять основные законы химии в своих теоретических изысканиях.

*Владеть:*

- теоретическими представлениями в области оптической электронной спектроскопии, электронной трансмиссионной спектроскопии, фотоэлектронной спектроскопии и электрохимических методов анализа;
- методологией выбора метода исследования и способностью разрабатывать теоретические модели, позволяющие объяснять экспериментальные результаты;
- представлением о форме изложения результатов исследований в научных публикациях.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

Введение. Теоретические и экспериментальные методы научных исследований. Методы установления строения и состава соединений, методы исследования электронной структуры молекул и механизмов химических реакций. Квантово-химические расчеты.

Анализ электронной структуры молекул методами квантовой химии. Основные принципы квантово-механического описания атомно-молекулярных систем. Волновое уравнение Шредингера

для молекулы, и методы его приближенного решения. Способы построения волновой функции молекулы: метод валентных связей и метод молекулярных орбиталей (основные идеи, достоинства и недостатки). Приближения, используемые при решении волнового уравнения: адиабатическое, одноэлектронное, МО ЛКАО. Вариационный метод Ритца, система вариационных уравнений. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ), его суть и роль в теории химической связи. Графическое и численное представление результатов расчета. Связывающие, разрыхляющие, несвязывающие и вырожденные МО. Расчет параметров электронной структуры молекул. Более строгие, чем метод МОХ, квантово-химические методы, учитывающие взаимодействие электронов. Понятие о полуэмпирических методах, основанных на приближении Хартри-Фока (MNDO, AM1, PM6 и др.). Методы *ab initio*. Метод функционала плотности (DFT). Иерархия расчетных методов квантовой химии.

Метод возмущения молекулярных орбиталей (ВМО). Польза теории возмущений при решении химических задач. Типы перекрывания АО и МО. Взаимодействие двух орбиталей, возмущение первого и второго порядка, количественная оценка расщепления уровней энергии на основе вариационного метода. Влияние симметрии, заселенности и относительной энергии смешивающихся МО (АО) на результат взаимодействия. Трехорбитальное взаимодействие. Построение  $\pi$ -МО линейных полиенов, симметрия и узловые свойства. МО аллильной системы. Построение  $\sigma$ -МО (на примере молекулы  $\text{C}_2\text{H}_4$ ).

Экспериментальные методы изучения электронной структуры молекул, позволяющие проводить оценку адекватности квантово-химических расчетов. Фотоэлектронная спектроскопия. Электронная трансмиссионная спектроскопия. Потенциал ионизации и электронное сродство, теорема Купменса. Электрохимические методы.

Электронная абсорбционная спектроскопия. Поглощение электромагнитного излучения веществом. Составляющие полной энергии молекул, и соотношение между уровнями вращательной, колебательной и электронной энергии основного и возбужденных состояний. Конфигурация электронно-колебательных уровней энергии, понятие о поверхности потенциальной энергии. Классическое и квантово-механическое описание колебаний двухатомной молекулы. Уравнение Морзе. Оценка заселенности колебательных уровней молекул при комнатной температуре. Принцип Франка-Кондона и форма полос поглощения в электронных спектрах.

Симметрия молекул. Характеристики основных групп симметрии. Неприводимые представления точечной группы. Прямое произведение представлений. Отнесение молекул к точечным группам. Определение симметрии орбиталей и состояний.

Общее рассмотрение электронных переходов. Порядок расположения МО и основные типы электронных переходов в молекулах органических хромофоров (номенклатура Каши). Характерные особенности полос  $n \rightarrow \pi^*$  и  $\pi \rightarrow \pi^*$  переходов и полос внутримолекулярного переноса заряда (ICT). Электронные конфигурации и электронные состояния. Спиновые характеристики многоэлектронной системы. Синглетные и триплетные состояния. Квантово-химический расчет энергии фотовозбуждения. Конфигурационное взаимодействие переходов.

Электронные переходы в электроно-дипольном приближении. Экспериментальная оценка вероятности переходов. Сила осциллятора, дипольный момент перехода. Поляризация переходов. Правила отбора по спину, по симметрии и по перекрыванию. Применение теории групп для оценки разрешенности/запрещенности перехода по симметрии. Влияние спин-орбитального и вибронного взаимодействий на интенсивность полос в электронных спектрах поглощения.

Многофотонное поглощение. Квантово-механическая модель процесса, его особенности (по сравнению с однофотонным) и экспериментальное наблюдение. Сечение многофотонного поглощения, примеры спектров. Преимущества использования двухфотонного возбуждения во флуоресцентной микроскопии клеток и медицине.

Теоретические и экспериментальные методы исследования механизмов реакций: идентификация промежуточных продуктов, кинетические исследования, метод меченых атомов, спектроскопия, стереохимические критерии, влияние заместителей и растворителя, квантово-химические расчеты поверхностей потенциальной энергии. Теория переходного состояния. Координата и энергетический профиль реакции. Свободная энергия, энтальпия и энтропия активации. Понятие о кинетическом и термодинамическом контроле реакций. Постулат Хэммонда.

Кинетические уравнения основных типов реакций. Метод стационарного состояния (принцип Боденштейна).

Эмпирический (экстратермодинамический) подход к оценке реакционной способности. Корреляционные уравнения, принцип линейности свободных энергий Гиббса. Уравнение Гаммета. Константы заместителей и константы реакций, их знак и абсолютная величина. Стерические эффекты. Уравнение Тафта.

Квантово-химический анализ реакционной способности органических соединений. Индексы реакционной способности. Приближение локализации, приближение изолированной молекулы. Метод граничных орбиталей. Зарядовый и орбитальный контроль органических реакций. Уравнение Клопмана. Концепция жестких и мягких кислот и оснований, ее использования для качественного предсказания направлений реакций электрофильного замещения в ароматическом ряду, электрофильного и нуклеофильного присоединения в ненасыщенных системах.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>3,0</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,95</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	0,25	9
Практические занятия (ПЗ)	0,7	25
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,05</b>	<b>38</b>
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,05	36
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>3,0</b>	<b>81</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,95</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	0,25	6,75
Практические занятия (ПЗ)	0,7	18,75
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,05</b>	<b>28,5</b>
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,05	28,5
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

#### Аннотация рабочей программы дисциплины «Деловой иностранный язык» (Б1.Б.03)

**1. Цель дисциплины** – приобретение обучающимися общей, коммуникативной и профессиональной компетенций, уровень которых на отдельных этапах языковой подготовки позволяет использовать иностранный язык как в профессиональной деятельности в сфере делового общения, так и для целей самообразования.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК) и общепрофессиональными (ОПК) компетенциями:

- способностью совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, получать знания в области современных проблем науки, техники и технологии, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-3);
- способностью на практике использовать умения и навыки в организации исследовательских и проектных работ и в управлении коллективом (ОК-5);
- готовностью использовать правовые и этические нормы при оценке последствий своей профессиональной деятельности, при разработке и осуществлении социально значимых проектов (ОК-6);
- готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках

для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-1);

- готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-2).

*Знать:*

- основные способы сочетаемости лексических единиц и основные словообразовательные модели;
- русские эквиваленты основных слов и выражений профессиональной речи;
- основные приемы и методы реферирования и аннотирования литературы по специальности;
- пассивную и активную лексику, в том числе общенаучную и специальную терминологию, необходимую для работы над типовыми текстами;
- приемы работы с оригинальной литературой по специальности.

*Уметь:*

- работать с оригинальной литературой по специальности;
- работать со словарем;
- вести деловую переписку на изучаемом языке;
- вести речевую деятельность применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации.

*Владеть:*

- иностранным языком на уровне профессионального общения, навыками и умениями речевой деятельности применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации, основами публичной речи;
- формами деловой переписки, навыками подготовки текстовых документов в управленческой деятельности;
- основной иноязычной терминологией специальности;
- основами реферирования и аннотирования литературы по специальности.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

Введение. Предмет и роль иностранного языка в деловом общении. Задачи и место курса в подготовке магистра техники и технологии.

1. Грамматические трудности изучаемого языка: личные, притяжательные и прочие местоимения. Спряжение глагола-связки. Образование и употребление форм пассивного залога. Порядок слов в предложении.

2. Чтение тематических текстов: «Введение в химию», «Д.И. Менделеев», «РХТУ им. Д.И. Менделеева». Понятие о видах чтения. Активизация лексики прочитанных текстов.

3. Практика устной речи по темам: «Говорим о себе», «В городе», «Район, где я живу». Лексические особенности монологической речи. Речевой этикет делового общения (знакомство, представление, установление и поддержание контакта, запрос и сообщение информации, побуждение к действию, выражение просьбы, согласия). Фонетические характеристики изучаемого языка. Особенности диалогической речи по пройденным темам.

4. Грамматические трудности изучаемого языка: инфинитив. Образование и употребление инфинитивных оборотов. Видовременные формы глаголов.

5. Изучающее чтение текстов по темам: «Структура вещества», «Неорганическая и органическая химия, соединения углерода». Лексические особенности деловой документации. Терминология бизнес-литературы на изучаемом языке.

6. Практика устной речи по теме «Студенческая жизнь». Стилистические и лексические особенности языка делового общения. Активный и пассивный тематический словарный запас.

7. Грамматические трудности изучаемого языка: причастия. Различные варианты перевода причастий на русский язык. Причастные обороты и приемы их перевода на русский язык. Сослагательное наклонение. Типы условных предложений. Варианты перевода предложений в сослагательном наклонении и условных предложений.

8. Изучающее чтение текстов по тематике: «Химическая лаборатория»; «Измерения в химии». Организация работы со специальными словарями. Понятие о реферировании текстов по специальности.

9. Практика устной речи по темам: «Страна изучаемого языка», «Проведение деловой встречи», «Заключение контракта». Устный обмен информацией: устные контакты в ситуациях делового общения.

10. Изучающее чтение специальных текстов. Приемы работы со словарем. Составление рефератов и аннотаций.

11. Ознакомительное чтение по тематике: «В банке. Финансы», «Деловые письма», «Устройство на работу». Формы делового письма. Понятие деловой корреспонденции. Приемы работы с Интернетом и электронной почтой.

12. Разговорная практика делового общения по темам: «Химические технологии», «Проблемы экологии». Сообщение информации по теме (монологическое высказывание) в рамках общенаучной и общетехнической тематики.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>72</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,9</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	-	-
Практические занятия (ПЗ)	0,9	34
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,1</b>	<b>38</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>54</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,9</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	-	-
Практические занятия (ПЗ)	0,9	25,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,1</b>	<b>28,5</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет</b>

#### Аннотация рабочей программы дисциплины

##### «Избранные главы процессов и аппаратов химических технологий» (Б1.Б.04)

1. **Цель дисциплины** – формирование у обучающихся общепрофессиональных компетенций, углубление и расширение знаний в области массообменных процессов химической технологии, в том числе с участием твердой фазы, и ряда тепловых процессов, позволяющих выпускникам осуществлять научно-исследовательскую и производственную деятельность.

2. **В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК) и общепрофессиональными (ОПК) компетенциями:

- способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);
- способностью совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, получать знания в области современных проблем науки, техники и технологии, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-4);
- способностью к профессиональному росту, к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности (ОК-5);
- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- готовностью использовать методы математического моделирования материалов и технологических процессов, готовностью к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез (ОПК-4).

#### *Знать:*

- теоретические основы процессов массопереноса в системах с участием твердой фазы;
- методы расчета массообменных аппаратов;
- основные закономерности равновесия и кинетики массообменных процессов с участием твердой фазы;
- методы интенсификации работы массообменных аппаратов;
- закономерности процесса выпаривания растворов, тепловые и материальные балансы процесса, методы расчета одно и многокорпусных выпарных установок;
- закономерности влияния структуры потоков в аппаратах на технологические процессы;
- основные уравнения равновесия при адсорбции и ионном обмене, динамику сорбции;
- методы расчета адсорбционных аппаратов.

#### *Уметь:*

- определять основные характеристики процессов с участием твердой фазы;
- определять параметры процессов в промышленных аппаратах с участием твердой фазы;
- решать конкретные задачи расчета и интенсификации массообменных процессов;
- определять параметры процесса выпаривания;
- использовать знания структуры потоков для расчета аппаратов.

#### *Владеть:*

- методами определения основных параметров оборудования, используемого для проведения технологических процессов с участием твердой фазы;
- методами определения основных параметров оборудования, используемого для проведения процессов выпаривания;
- методами определения реальной структуры потоков в аппаратах для определения параметров технологических процессов.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

#### *Модуль 1. Процессы и аппараты выпаривания растворов.*

Процесс выпаривания растворов и области его применения. Процесс выпаривания растворов в одноступенчатых выпарных аппаратах. Материальный баланс однокорпусного выпарного аппарата. Определение расхода энергии на проведение процесса в однокорпусном выпарном аппарате. Определение температуры кипения раствора. Виды температурных потерь (депрессий) и их определение. Многокорпусное выпаривание, схемы прямоточных и противоточных установок. Материальный и тепловой баланс многокорпусных выпарных установок. Определение полезной разности температур в многокорпусной выпарной установке и способы ее распределения по корпусам. Конструкции выпарных аппаратов.

#### *Модуль 2. Структура потоков в тепло и массообменных аппаратах и реакторах.*

Влияние продольного перемешивания на эффективность работы колонных массообменных аппаратов и теплообменной аппаратуры. Структура потоков в случае простейших идеальных моделей: идеальное вытеснение (МИВ) и идеальное смешение (МИС). Методы исследования структуры потоков. Импульсный и ступенчатый ввод трассера. Время пребывания. Дифференциальная и интегральная функции распределения времени пребывания, их взаимосвязь. Математические модели структуры потоков в приближении к реальным системам. Ячеечная модель: число ячеек идеального смешения как параметр модели. Диффузионная однопараметрическая модель: среднее время пребывания, дисперсия. Дисперсионное число (обратный критерий Пекле, коэффициент продольного перемешивания).

#### *Модуль 3. Изучение процесса сушки в химической промышленности.*

Контактная и конвективная сушки. Сушильные агенты, используемые в процессе сушки. Свойства влажного воздуха как сушильного агента. «Н-Х» диаграмма состояния влажного воздуха (диаграмма Рамзина). Материальный и тепловой баланс конвективной сушильной установки. Теоретическая (идеальная) сушилка. Внутренний баланс сушильной камеры. Уравнение рабочей линии процесса сушки. Изображение процесса сушки на «Н-Х» диаграмме. Смешение газов различных параметров. Варианты проведения процесса конвективной сушки: основной; с дополнительным подводом теплоты в сушильной камере; с промежуточным подогревом воздуха по



зонам сушильной камеры; с рециркуляцией части отработанного воздуха. Контактная сушка. Равновесие фаз при сушке. Формы связи влаги с материалом. Изотермы сушки. Гигроскопическая точка материала. Кинетика сушки. Кривая сушки и кривая скорости сушки. Конструкции конвективных сушилок: камерная; многоярусная ленточная; барабанная; пневматическая; петлевая; распылительная. Сушка в кипящем слое.

*Модуль 4. Адсорбция в системе «жидкость – твердое» и «газ – твердое». Экстракция в системе «жидкость – жидкость».*

Адсорбция в системе «газ – твердое» и «жидкость – твердое». Кинетика массопереноса в пористых телах: микро-, мезо- и макропоры. Равновесие при адсорбции. Изотермы адсорбции. Статическая и динамическая активность адсорбентов. Фронт адсорбции. Устройство и принцип действия адсорберов. Теоретические основы экстракции в системе «жидкость – жидкость». Изображение состава фаз и процессов на тройной диаграмме. Предельные расходы экстрагента. Многоступенчатая экстракция с перекрестным и противоточным движением фаз. Методы расчета основных типов экстракционных аппаратов. Промышленная экстракционная аппаратура.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>3,0</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,4</b>	<b>51</b>
Лекции (Лек)	0,45	16
Практические занятия (ПЗ)	0,95	35
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,1</b>	<b>39</b>
Расчетно-графическая работа	0,67	24
Другие виды самостоятельной работы	0,41	15
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>0,5</b>	<b>Экзамен (18)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>3,0</b>	<b>81</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,4</b>	<b>38,25</b>
Лекции (Лек)	0,45	12,00
Практические занятия (ПЗ)	0,95	26,25
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>0,67</b>	<b>29,25</b>
Расчетно-графическая работа	0,41	18
Другие виды самостоятельной работы	<b>0,5</b>	11,25
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>3,0</b>	<b>Экзамен (13,5)</b>

#### Аннотация рабочей программы дисциплины

##### «Оптимизация химико-технологических процессов» (Б1.Б.05)

**1. Цель дисциплины** – получение базовых знаний о методах оптимизации химико-технологических процессов и приобретение опыта их применения для решения оптимизационных задач, в частности с использованием автоматизированной системы компьютерной математики (СКМ) MATLAB, а также овладение с его помощью практикой компьютерного моделирования систем химической технологии с решением задач анализа, оптимизации и синтеза химико-технологических процессов (ХТП) и систем (ХТС). Дисциплина направлена на приобретение обучающимися знаний по применению аналитических и численных методов оптимизации с использованием адекватных моделей химико-технологических процессов и овладение приемами и практикой применения пакета MATLAB для решения оптимизационных задач химической технологии.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК) и общепрофессиональными (ОПК) компетенциями:

- готовностью действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения (ОК-2);
- готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3);
- способностью к профессиональному росту, к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности (ОК-5);
- способностью на практике использовать умения и навыки в организации исследовательских и проектных работ, в управлении коллективом (ОК-7);
- способностью находить творческие решения социальных и профессиональных задач, готовностью к принятию нестандартных решений (ОК-8);
- способностью с помощью информационных технологий к самостоятельному приобретению и использованию в практической деятельности новых знаний и умений, в том числе в областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности (ОК-9);
- готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-1);
- готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-2);
- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- готовностью использовать методы математического моделирования материалов и технологических процессов, готовностью к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез (ОПК-4);
- готовностью к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности (ОПК-5).

*Знать:*

- иерархическую структуру химико-технологических процессов и методику системного анализа химических производств;
- методы компьютерного моделирования химико-технологических процессов;
- численные методы вычислительной математики для реализации на компьютерах моделей химико-технологических процессов;
- способы применения компьютерных моделей химико-технологических процессов для решения задач научных исследований, а также задач анализа и оптимизации химико-технологических систем;
- принципы применения методологии компьютерного моделирования при автоматизированном проектировании и компьютерном управлении химическими производствами.

*Уметь:*

- применять полученные знания при решении профессиональных задач компьютерного моделирования процессов в теплообменниках и химических реакторах;
- решать обратные задачи структурной и параметрической идентификации математического описания процессов химических превращений в реакторах с мешалкой и трубчатых реакторах, а также математического описания процессов теплопередачи в теплообменниках;
- решать прямые задачи компьютерного моделирования процессов в реакторах с мешалкой;
- решать прямые задачи компьютерного моделирования процессов в трубчатых реакторах;
- решать задачи оптимизации процессов химических превращений в реакторах и процессов теплопередачи в теплообменниках.

*Владеть:*

- методами применения стандартных пакетов прикладных программ, в частности пакета MATLAB, для моделирования и оптимизации процессов в теплообменниках, а также в химических реакторах идеального перемешивания и идеального вытеснения.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

*Модуль 1. Характеристика задач оптимизации процессов химической технологии.*

Тема 1. Иерархическая структура процессов химических производств, их математическое моделирование и оптимизация. Химико-технологические системы и их иерархическая структура. Компьютерное моделирование химических производств. Этапы математического моделирования и оптимизации. Разработка математического описания процессов и алгоритмов расчета химико-технологических процессов. Применение методологии системного анализа и CALS-технологий для решения задач моделирования и оптимизации в автоматизированных системах АИС, САПР, АСНИ, АЛИС, АСУ и АСОУП. Применение принципа «черного ящика» при математическом моделировании. Математическое описание процессов, моделирующий алгоритм и расчетный модель химико-технологического процесса. Виртуальное производство. Автоматизированные системы прикладной информатики.

Тема 2. Основные принципы оптимизации стационарных и динамических процессов химической технологии. Задачи оптимального проектирования и управления. Анализ, оптимизация и синтез химико-технологических систем. Экономические, технико-экономические и технологические критерии оптимальности химических производств. Выбор критериев оптимальности (целевых функций) и оптимизируемых переменных (ресурсов оптимизации). Численные методы одномерной и многомерной оптимизации с ограничениями I-го и II-го рода. Структура программ для решения оптимизационных задач с применением пакета MATLAB, ввод и вывод информации, в том числе с использованием текстовых файлов.

*Модуль 2. Оптимизация типовых химико-технологических процессов.*

Тема 3. Аналитические методы оптимизации химико-технологических процессов. Необходимые и достаточные условия экстремумов функций многих переменных. Квадратичные формы. Графическое представление экстремумов функций одной и двух переменных с применением пакета MATLAB. Определение оптимальных условий протекания обратимой химической реакции. Анализ оптимальных условий протекания простых реакций в реакторах с мешалкой и экономическим критерием оптимальности.

Тема 4. Численные методы одномерной оптимизации. Методы сканирования, локализации переменной и золотого сечения, а также с обратным переменным шагом и чисел Фибоначчи. Стандартная функция MATLAB для определения минимума функции одной переменной – fminbnd. Решение алгебраических и трансцендентных уравнений с применением стандартных функции MATLAB – roots и fzero соответственно.

Тема 5. Численные методы многомерной оптимизации. Методы нулевого, первого и второго порядка. Решение задач оптимизации процессов, решения систем нелинейных уравнений и аппроксимации данных с применением стандартной функции MATLAB fminsearch. Решение задач аппроксимаций функций многочленами произвольной степени с применением стандартной функции MATLAB – polyfit, а также решения систем линейных алгебраических уравнений методом обратной матрицы с использованием стандартной функции MATLAB –  $\backslash$ (-1). Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений с применением стандартных функций MATLAB – ode45 (45 – номер конкретного метода) или для жестких систем – тех же функций с добавлением одного из символов t, tb или s (в зависимости от степени жесткости систем).

*Модуль 3. Оптимизация процессов в каскаде последовательных и параллельных аппаратов химических производств.*

Тема 6. Оптимизация процессов в каскаде последовательных и параллельных аппаратов с ограничениями в виде равенств с применением метода множителей Лагранжа. Понятия условного экстремума и неопределенных множителей Лагранжа. Вывод соотношений для определения экстремума функции Лагранжа. Оптимальное распределение потока сырья между параллельно работающими аппаратами. Оптимизация последовательных многостадийных процессов методом неопределенных множителей Лагранжа.

Тема 7. Принцип динамического программирования и его графическая иллюстрация. Постановка задачи динамического программирования (ДП). Математическая формулировка принципа максимума Беллмана. Решение комбинаторной задачи о коммивояжере методом динамического программирования.

Тема 8. Оптимизация процессов в каскаде последовательных аппаратов методом динамического программирования. Вывод соотношений для решения задачи минимизации суммарного объема каскада последовательных химических реакторов, в которых протекает простейшая реакция первого порядка. Графическое решение задачи динамического программирования для каскада последовательных реакторов, в которых протекает простейшая реакция второго порядка.

*Модуль 4. Технологическая оптимизация процессов химических производств методом нелинейного программирования.*

Тема 9. Оптимизация процессов химической технологии для действующих производств при известных значениях конструкционных параметров. Формулировка задачи нелинейного программирования (НЛП) с ограничениями I-го и II-го рода. Решение задачи НЛП с применением стандартной функции MATLAB – fmincon. Определение оптимального времени пребывания в реакторе идеального перемешивания и периодическом реакторе, в которых протекает простейшая последовательная реакция, а также оптимальной температуры – в реакторе идеального перемешивания с простейшей обратимой реакцией

Тема 10. Определение оптимальных значений конструкционных параметров при проектировании химических производств. Формулировка задачи нелинейного программирования (НЛП) с ограничениями I-го и II-го рода. Решение задачи НЛП с применением стандартной функции MATLAB – fmincon. Решение задачи оптимального проектирования теплообменника типа «смешение – смешение» с технико-экономическим критерием оптимальности.

*Модуль 5. Экономическая оптимизация производственных процессов методом линейного программирования.*

Тема 11. Оптимизация производства изделий при ограничениях на изготовление комплектующих деталей. Формулировка задачи линейного программирования (ЛП) и ее геометрическая интерпретация. Условия совместности задачи ЛП. Анализ 3-х возможных вариантов решений. Графическое решение задачи ЛП. Решение конкретной задачи ЛП с применением стандартной функции MATLAB – linprog.

Тема 12. Оптимальная организация производства продукции при ограниченных запасах сырья. Формулировка задачи линейного программирования (ЛП) и ее геометрическая интерпретация. Условия совместности задачи ЛП. Анализ 3-х возможных вариантов решений. Графическое решение задачи ЛП. Решение конкретной задачи ЛП с применением стандартной функции MATLAB – linprog.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>144</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>51</b>
Практические занятия (ПЗ)	0,95	34
Лабораторные занятия (Лаб)	0,47	17
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,58</b>	<b>93</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>38,25</b>
Практические занятия (ПЗ)	0,95	25,5
Лабораторные занятия (Лаб)	0,47	12,75
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,58</b>	<b>69,75</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет</b>

## **«Оценка рисков и экономической эффективности при внедрении инновационных решений и технологий» (Б1.Б.06)**

**1. Цель дисциплины** – получение системы научных знаний в области современных проблем науки, техники и технологий, с применением методологии комплексной оценки и анализа основных рисков при внедрении инновационных технологий в системе национальной экономики с использованием инструментов эффективного управления. Программа направлена на изучение понятийного аппарата дисциплины, обучение методам и инструментам оценки рисков профессиональной деятельности, оценки экономической эффективности технологических процессов, их безопасности и обучение методам экономического анализа производственных рисков при внедрении новых технологий; способам разработки и анализа альтернативных технологических процессов, обучение методам прогнозирования технологических, экономических и последствий, а также обучение навыкам участия в разработке проектов новых ресурсосберегающих и безопасных производств.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК) компетенциями:

- способностью совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, получать знания в области современных проблем науки, техники и технологии, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-4).

*Знать:*

- теоретические особенности и действующую практику в области оценки экономической эффективности и управления инновационными рисками;
- содержание способы и инструменты экономического анализа;
- методы расчета экономической эффективности принятия инновационных решений.

*Уметь:*

- проводить оценку и экономический анализ научной, технической документации в области инновационных видов деятельности и рассчитать эффективность управления рисками;
- оценивать экономическую эффективность и последствия принимаемых решений в области профессиональной деятельности.

*Владеть:*

- методами и инструментами разработки и анализа альтернативных технологических процессов, прогнозирования технологических, экономических и последствий;
- методами и инструментами оценки экономической эффективности технологических процессов, их безопасности и технологических рисков при внедрении новых технологий;
- навыками участия в разработке проектов новых ресурсосберегающих и безопасных производств.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

*Неопределенность и риск: общие понятия и приближенные методы учета.* Общее понятие о неопределенности и риске. Множественность сценариев реализации проекта. Понятия об эффективности и устойчивости проекта в условиях неопределенности. Формирование организационно-экономического механизма реализации инновационных решений с учетом факторов неопределенности и риска. Риск-аппетит компании. Основные системы управления. Укрупненная оценка устойчивости инвестиционного проекта. Премия за риск. Кумулятивный метод оценки премии за риск. Модель оценки капитальных активов (САРМ). Управление по MRP-системе и др.

*Расчеты ожидаемой эффективности проекта.* Укрупненная оценка устойчивости проекта для его участников. Расчет границ безубыточности и эффективности. Оценка устойчивости проекта путем варьирования его параметров. Оценка эффективности принятия решения в условиях неопределенности. Вероятностная (стохастика), субъективные вероятности и их использование при оценке эффективности проектов. Формула Гурвица. Методы и инструменты управления ресурсами.

*Оптимизация и рациональный отбор проектов.* Задачи отбора и оптимизации проектов и их решение. Учет вложений собственных ресурсов. Методы альтернативных решений, издержек, единовременные и текущие издержки. Альтернативная стоимость ресурса в условиях риска и др. показатели, оцениваемые при расчете эффективности принятия решений. Составление реестра причинно-следственных связей проявления рисков. Количественная и качественная оценка рисков.

*Экономическая и финансовая оценка рисков профессиональной деятельности.* Современная и будущая стоимости денежного потока. Теоретические основы дисконтирования в условиях неопределенности. Особенности оценки проектов в условиях современной российской экономики. Оценка финансовой реализуемости проекта и эффективности участия в нем акционерного капитала. Использование опционной техники при оценке инвестиций. Различные аспекты влияния фактора времени. Последовательность проявления рисков.

*Предварительная аналитическая оценка проекта. Упрощенный пример оценки эффективности и финансовой реализуемости проекта.* Обычная методика. Уточненная методика. Определение ЧДД. Определение ВИД. Определение срока окупаемости от начала проекта. Определение финансовой реализуемости проекта и эффективности акционерного капитала. Пример полного расчета показателей эффективности и экономической оценки рисков профессиональной деятельности.

*Деловая игра. Обучение навыкам участия в разработке проектов новых безопасных производств и экономической оценке рисков профессиональной деятельности.* Исходные данные. Макро- и микроэкономическое окружение в рыночной экономике. Инструменты целеполагания в системе рисков. Основные сведения об операционной деятельности. Методология оценки рисков научной и профессиональной деятельности в условиях неопределенности. Формирование команды проекта. Организация и управление успешной работы команды проекта безопасного производства и экономическая оценка рисков профессиональной деятельности.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>72</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>34</b>
Практические занятия (ПЗ)	0,94	34
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>38</b>
Реферат (экономический расчет, оценка риска)	1,06	38
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>54</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>25,5</b>
Практические занятия (ПЗ)	0,94	25,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>28,5</b>
Реферат (экономический расчет, оценка риска)	1,06	28,5
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет</b>

#### 4.4.2. Дисциплины вариативной части (обязательные дисциплины)

##### Аннотация рабочей программы дисциплины

#### «Дополнительные главы математики в химической технологии тонкого органического синтеза» (Б1.В.01)

**1. Цель дисциплины** – знакомство с современными методами статистической обработки экспериментальных данных с использованием средств информационных технологий на основе углубленного изучения курса математической статистики. Дисциплина направлена на получение представлений об актуальных проблемах использования статистических методов в химии и химической технологии, а также практическую реализацию основных подходов к анализу данных с использованием вероятностно-статистических методов.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общепрофессиональными (ОПК) и профессиональными (ПК) компетенциями:

- готовностью использовать методы математического моделирования материалов и технологических процессов, готовностью к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез (ОПК-4);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Знать:*

- основные приемы и методы обработки статистической информации: расчёт выборочных характеристик случайных величин, использование статистических гипотез для переноса результатов выборочного обследования на генеральную совокупность;
- методы регрессионного и корреляционного анализа;
- основы дисперсионного анализа;
- методы анализа многомерных данных;
- базовую терминологию, относящуюся к теоретическому описанию основных перспективных направлений развития методов обработки экспериментальных данных.

*Уметь:*

- анализировать и критически оценивать современные научные достижения в области своих научных исследований;
- использовать полученные знания для решения профессиональных и социальных задач.

*Владеть:*

- базовой терминологией, относящейся к статистической обработке экспериментальных данных;
- практическими навыками обработки статистической информации с использованием информационных технологий;
- методологией современных научных исследований, критической оценкой полученных результатов, творческим анализом возникающих новых проблем в области химии и химической технологии.

### **3 Краткое содержание дисциплины**

*Введение.* Основные статистические методы анализа экспериментальных данных.

*1. Основы математической статистики.* Задачи математической статистики. Выборки. Статистическое распределение выборки. Интервальная таблица, гистограмма частот. Типы измерительных шкал. Статистические оценки параметров распределения, их свойства. Точечные оценки. Интервальные оценки параметров распределения.

Проверка статистических гипотез. Основные понятия. Схема проверки гипотезы. Проверка гипотезы о виде распределения.  $\chi^2$ -критерий согласия Пирсона. Сравнение двух дисперсий нормальных распределений. Сравнение двух средних нормальных распределений.

*2. Статистические методы анализа данных.* Регрессионный и корреляционный анализ. Линейная регрессия, множественная линейная регрессия. Оценка уровней значимости коэффициентов регрессионного уравнения. Модели нелинейных регрессий. Вычисление коэффициента корреляции Пирсона по выборочным данным. Проверка гипотезы значимости коэффициента корреляции. Ранговые коэффициенты корреляции Спирмена и Кендалла. Дисперсионный анализ: понятие дисперсионного анализа, основные определения. Однофакторный и двухфакторный дисперсионный анализ.

*3. Статистическая обработка многомерных данных.* Назначение и классификация многомерных методов. Методы предсказания. Методы классификации. Многомерный регрессионный анализ. Множественная регрессия. Факторный анализ. Основные понятия и предположения факторного анализа. Общий алгоритм. Основные этапы факторного анализа. Дискриминантный анализ. Основные понятия и предположения дискриминантного анализа. Дискриминантный анализ как метод классификации объектов. Кластерный анализ. Общая характеристика методов кластерного анализа. Меры сходства. Иерархический кластерный анализ. Метод k-средних. Критерии качества классификации. Компьютерный анализ статистических данных. Характеристика и особенности построения пакетов Excel, MathCad, SPSS, Statistica.

*Заключение.*

### **4. Объем учебной дисциплины**

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>72</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	0,47	16
Практические занятия (ПЗ)	0,47	18
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>38</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	-	<b>Зачет с оценкой</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>54</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	0,47	12,0
Практические занятия (ПЗ)	0,47	13,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>28,5</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	-	<b>Зачет с оценкой</b>

### **Аннотация рабочей программы дисциплины «Информационные технологии в образовании» (Б1.В.02)**

**1. Цель дисциплины** – подготовка студентов в области информационного сопровождения научной деятельности, привитие навыков самостоятельного поиска химической информации в различных источниках. Дисциплина направлена на ознакомление студентов с наиболее представительными отечественными и зарубежными информационными ресурсами, с современными информационными технологиями и Интернет-технологиями, используемыми для сопровождения научной деятельности, а также возможностями применения их при решении конкретных практических задач.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общепрофессиональными (ОПК) и профессиональными (ПК) компетенциями:

- готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-1);
- готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-2);
- способностью использовать современные информационные технологии для сбора, обработки и распространения научной информации в области биотехнологии и смежных отраслей, способностью использовать базы данных, программные продукты и ресурсы Интернета для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-5);
- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Знать:*

- основные составляющие информационного обеспечения процесса сопровождения научной деятельности, понятия и термины;
- основные отечественные и зарубежные источники профильной информации;



- общие принципы получения, обработки и анализа научной информации.

*Уметь:*

- выделять конкретные информационные технологии, необходимые для информационного обеспечения различных научных потребностей;
- находить профильную информацию в различных отечественных и зарубежных информационных массивах;
- обрабатывать и анализировать данные с целью выявления релевантной информации.

*Владеть:*

- знаниями о современных автоматизированных информационно-поисковых системах (АИПС), их возможностях, способах взаимодействия с ними;
- практическими навыками информационного поиска с помощью технологий телекоммуникационного доступа и Интернет-технологий;
- основными подходами для анализа полученной данных и использования их в своей профессиональной деятельности.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

*Модуль 1. Введение. Основные понятия и термины. Государственная система научно-технической информации. Информационные издания и базы данных.*

Распространение и старение информации. Специфика информации по химии и химической технологии. Информационные системы (ИС) и информационные технологии. Структура и классификация ИС. Реферативные журналы: Реферативный журнал «Химия», «Chemical Abstracts». Структура, указатели, алгоритмы различных видов поиска. Автоматизированные информационно-поисковые системы (АИПС). Диалоговые поисковые системы: основные функции и возможности, способы доступа. Информационные технологии и информационные ресурсы. Этапы развития информационных технологий. Виды информационных технологий. Основные компоненты телекоммуникационного доступа к ресурсам АИПС. Алгоритм информационного поиска в режиме телеслеса. Выбор лексических единиц, использование логических и позиционных операторов. Информационно-поисковый язык. Логика и стратегия поиска. Базы данных (БД). Банки данных. Структура, функции, назначение. Типы баз данных и банков данных.

*Модуль 2. Информационные ресурсы сети Internet. Отечественные источники информации по химии и смежным областям.*

АИПС Всероссийского института научной и технической информации (ВИНИТИ). Основные базы данных ВИНИТИ. Предметное содержание и наполнение. Структура документов в БД ВИНИТИ. Информационно-поисковый язык. Поисковая стратегия. АИПС STN-International. Информационно-поисковая система STN-International. Особенности АИПС STN-International. Организация и возможности поиска. Различные виды поиска (STN-easy, STN Express, STN on the Web и др.). Знакомство с основными видами источников информации: монографии, диссертации, авторефераты, статьи, патенты, депонированные рукописи, тезисы конференций, сетевые публикации, стандарты и т.п. Особенности оформления ссылок на данные источники. Использование отечественных баз данных РГБ, ГПНТБ, ВИНИТИ, РНБ и др. Использование возможностей библиотеки eLibrary. Индексы цитирования. Тематический поиск.

*Модуль 3. Информационные ресурсы сети Internet. Зарубежные источники информации по химии и смежным областям.*

Обзор существующих информационных источников в области химии, химической технологии и смежных наук. Информационные порталы и сайты электронных изданий: сайт электронных журналов Американского химического общества, портал Informaworld издательства TAYLOR&FRANCIS, информационный портал SCIENCE DIRECT издательства ELSEVIER, порталы издательств SPRINGER, WILLEY&SONS и др. Информационные возможности Science Direct. Поисковый интерфейс, поисковый язык, наукометрические функции, дополнительные функции. Электронные издания Американского химического общества. Общая характеристика. Информационные и поисковые возможности. Понятие DOI. Поисковый язык. Агрегаторы научно-технической информации Reaxys, Web of Science, Scopus, Google Academy. Индексы цитирования. Тематический поиск.

*Модуль 4. Источники патентной информации.*

Понятие объектов интеллектуальной собственности. Патентная документация как информационный массив. Основные понятия и определения в области патентования. Объекты изобретений. Патентное законодательство. Международная патентная классификация (МПК). Патентный поиск. Особенности и виды поиска. Отечественные и зарубежные автоматизированные информационно-поисковые системы патентной информации. Характеристика, организация, возможности поиска. БД Федерального института промышленной собственности (ФИПС). Состав и возможности доступа. Структура патентного документа в БД. БД Американского патентного ведомства United States Patent and Trademark Office (USPTO). Состав БД USPTO. Возможности доступа. Структура патентного документа в БД. БД ESPACENET. Коллекция патентных БД ESPACENET. Возможности доступа. Структура патентного документа в БД. Виды и возможности поиска.

#### *Модуль 5. Интернет как технология и информационный ресурс.*

Использование технологии вебинаров в учебном процессе. Использование систем контроля версий GitHub. Виды поисковых машин. Структура и принцип работы поисковых машин. Поисковая система Google. Приемы поиска информации. Сервисы портала Google. Электронная почта Gmail и сервис GoogleTalk. Поиск научной информации в GoogleScholar. Автоматический переводчик веб-страниц. Энциклопедические порталы Интернет. Технология Wiki. История возникновения и структура свободной энциклопедии Wikipedia. Совместная работа над документами и организации совместного онлайн пространства для научной работы. Эффект самоорганизации в глобальной компьютерной сети. Характеристика социальных сетей. Понятие о блогосфере.

#### **4. Объем учебной дисциплины**

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>72</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	-	-
Практические занятия (ПЗ)	0,94	34
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>38</b>
Реферат	0,5	18
Другие виды самостоятельной работы	0,56	20
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>54</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	-	-
Практические занятия (ПЗ)	0,94	25,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>28,5</b>
Реферат	0,5	13,5
Другие виды самостоятельной работы	0,56	15
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет</b>

#### **Аннотация рабочей программы дисциплины «Химия гетероциклических соединений» (Б1.В.03)**

**1. Цель дисциплины** – углубление знаний, умений, владений и формирование компетенций в области методов синтеза ароматических гетероциклических соединений, взаимосвязей «структура – метод синтеза – свойства» ароматических гетероциклических соединений.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими профессиональными (ПК) компетенциями:

– способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую

работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);

- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2).

*Знать:*

- современное состояние химии гетероциклических соединений;
- современные методы синтеза и области применения гетероциклических соединений; современные концепции, связывающие структуру и свойства гетероциклических систем.

*Уметь:*

- проводить анализ научной литературы в области современной органической химии;
- предполагать возможные пути синтеза гетероциклических соединений и их свойства.

*Владеть:*

- методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и практическим аспектам органической химии;
- теоретическими основами современных физико-химических методов анализа строения и свойств органических веществ.

### 3. Краткое содержание дисциплины

Строение и физико-химические свойства ароматических гетероциклических соединений. Таутомерия гетероциклических систем. Реакционная способность ароматических гетероциклических соединений. Реакции ароматического электрофильного и нуклеофильного замещения. Применение металлорганических реагентов в синтезе гетероциклов. Реакции, катализируемые соединениями палладия.

Синтез ароматических гетероциклических соединений. Типы реакций и реагентов. электроциклические процессы в синтезе гетероциклических соединений.

Общая характеристика реакционной способности и методы синтеза основных классов гетероциклических соединений (пиридины, хинолины и изохинолины, хромоны, кумарины, пирролы, тиофены, фураны, индолы, имидазолы, тиазолы, оксазолы, пиразолы). Гетероциклы, содержащие узловой атом азота. Основные химические свойства и методы синтеза насыщенных и частично ненасыщенных гетероциклических соединений.

Области применения гетероциклических соединений.

### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>2,06</b>	<b>74</b>
Лекции (Лек)	0,50	18
Практические занятия (ПЗ)	1,56	56
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,94</b>	<b>106</b>
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,94	106
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>162</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>2,06</b>	<b>55,5</b>
Лекции (Лек)	0,50	13,5
Практические занятия (ПЗ)	1,56	42,0
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,94</b>	<b>79,5</b>
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,94	79,5
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

**1. Цель дисциплины** – получение дополнительных знаний о подходах к исследованию свойств поверхности высокотемпературных функциональных материалов; получение умений в области прогнозирования свойств поверхности, и формирование компетенций в области проектирования структуры и свойств поверхности высокотемпературных функциональных материалов. Программа включает в себя углубленное изучение экспериментальных и теоретических методов исследования процессов, происходящих на границах раздела фаз «твердое – газ» и «твердое – жидкость», и методов определения свойств реальных поверхностей.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общепрофессиональными (ОПК) и профессиональными (ПК) компетенциями:

- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- готовностью к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез (ОПК-4);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Знать:*

- суть системного подхода при разработке химико-технологического процесса;
- основные математические модели, описывающие структуру потока в реакторах непрерывного действия;
- способы учета отклонения структуры потока в реальных химических системах от идеальных моделей;
- методы определения структуры потока в реальных системах;
- математическое описание условий теплообмена в зависимости от организации процесса, структуры потока и особенностей теплообмена;
- подходы к учету особенностей массообмена для гетерогенных процессов.

*Уметь:*

- оценивать необходимость математического моделирования для конкретного химического превращения;
- провести определение математической модели структуры потока на основании данных метода индикаторного возмущения;
- провести оценку эффективности химического превращения в зависимости от организации процесса и математической модели структуры потока;
- рассчитывать необходимую поверхность теплопередачи для реакторов непрерывного, периодического и полупериодического действия.

*Владеть:*

- общей методологией математического описания химического процесса для различных способов его реализации;
- методами расчетов на основании математических моделей для оценки эффективности химического реактора;
- подходами, позволяющими на начальном этапе разработки химико-технологического процесса, осуществить выбор организации процесса и потенциального реактора.

**3. Краткое содержание дисциплины**

Введение. Цели и задачи дисциплины. Этапы разработки химико-технологического процесса (ХТП). Применение системного подхода при разработке ХТП. Химическая система, ее входные, выходные параметры, параметры возмущения и регулирования. Математическая модель – связь между параметрами системы с учетом конструкции реактора. Составные части математической модели

непрерывного процесса – материальный баланс (структура потока и кинетика процесса), тепловой баланс (структура потока, теплопередача и теплообмен), массопередача (структура потока и массообмен). Определяющая роль структуры потока.

Индикаторный и кинетический метод определения структуры потока.

Сущность индикаторного метода. Требования, предъявляемые к индикатору для изучения структуры потока. Идеальные математические модели. Реакторы идеального смешения, вытеснения, ячеечная модель. Их передаточные функции, отклик на импульсное возмущение индикатора, дифференциальные функции распределения времени пребывания. Сравнение эффективности идеальных моделей. Тепловые балансы для адиабатического режима и с теплообменом через поверхность теплопередачи.

Причины отклонения структуры потока реальных систем от идеальных моделей. Комбинированные модели: диффузионная модель, ячеечная модель с обратными потоками, рециркуляционная модель с застойной зоной.

Экспериментальное определение структуры потока, анализ отклика на импульсное индикаторное возмущение с помощью моментов распределения (начальные и центральные). Алгоритм определения структуры потока, установление адекватности модели. Моделирование периодических процессов с учетом теплообмена. Моделирование полупериодических процессов с учетом теплообмена. Расчет минимально необходимой поверхности теплопередачи.

Конкретные примеры математического моделирования. Адиабатическое хлорирование бензола по Беркману. Критериальные уравнения, описывающие режим эмульгирования. Расчет достижимой степени превращения, необходимого времени пребывания. Сравнение эффективности реакторов для хлорирования бензола. Сульфирование 2-нафтола, как пример необходимости учета при моделировании процессов массообмена между жидкой и твердой фазами. Механизмы с учетом процессов массообмена, оценка их адекватности. Каталитическое восстановление нитросоединений водородом в жидкой фазе. Расчет распределения раствора нитросоединения и водорода по ступеням восстановления, распределения температуры, определение высоты катализатора на ступени восстановления. Математическое описание контактно-каталитических процессов в аппаратах колонного типа, трубчатого типа и в условиях псевдооживленного (кипящего) слоя катализатора.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>144</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	0,22	8
Практические занятия (ПЗ)	0,72	26
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,06</b>	<b>74</b>
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,06	74
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>1108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	0,22	6,0
Практические занятия (ПЗ)	0,72	19,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,06</b>	<b>55,5</b>
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,06	55,5
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

#### Аннотация рабочей программы дисциплины

##### «Теория цветности и свойства фотовозбужденных состояний» (Б1.В.05)

1. Цель дисциплины – углубление знаний, умений, владений и формирование компетенций в области учения о зависимости между строением органических соединений, их цветом и спектрально-

люминесцентными характеристиками, а также получение представления об основных физических каналах релаксации фотовозбужденных состояний, обуславливающих применение органических красителей в современных нетрадиционных областях.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими профессиональными (ПК) компетенциями:

- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);

*Знать:*

- причины появления окраски у физических тел и способы формирования цветоощущения;
- основные элементы хромофорных систем органических фотоактивных соединений;
- способы количественной оценки цвета и поглощенного излучения, основные параметры спектров поглощения и испускания, методы их экспериментального определения; пути релаксации возбужденных состояний органических хромофоров;
- области практического применения фотоактивных соединений в зависимости от преобладания того или иного механизма диссипации энергии электронного возбуждения.

*Уметь:*

- применять метод возмущения молекулярных орбиталей для проведения анализа эффективности взаимодействия структурных элементов молекул и их влияния на энергию и взаимное расположение молекулярных орбиталей, что определяет светопоглощающие свойства органических молекулярных систем;
- давать оценку влияния эффектов среды на положение полос в электронных спектрах поглощения;
- анализировать влияние структурных изменений, природы растворителя и микроокружения на люминесцентные характеристики органических хромофорных соединений.

*Владеть:*

- общей методологией изучения спектрально-люминесцентных свойств органических хромофоров в конденсированной фазе с использованием методов стационарной и время-разрешенной оптической электронной спектроскопии;
- графическим способом представления энергии электронно-колебательных состояний с использованием диаграммы Яблонского;
- подходами и особенностями выяснения взаимосвязей между химическим строением молекул, их электронно-орбитальной структурой, способностью интенсивно поглощать световую энергию в видимом и ближнем УФ и ИК диапазоне, а также возможностью участия в возбужденном состоянии в моно- и бимолекулярных релаксационных процессах

### **3. Краткое содержание дисциплины**

**Введение.** Цели и задачи дисциплины. Развитие представлений и взаимосвязи между строением соединения и его цветом. Ранние химические теории цветности (хромофорно-ауксохромная, координационно-ненасыщенных атомов и хиноидная). Переход к электронной теории цветности органических соединений. Зарождение и развитие фотохимии в XX в. Современное определение понятия «краситель». Типы красителей в зависимости от способа преобразования поглощенной световой энергии. Понятие о хромофорной системе красителей, основные элементы хромофорной системы.

**Физические основы цветности.** Двойственная природа электромагнитного излучения, его основные параметры и энергетические характеристики. Трихроматическая теория цветного зрения человека. Способы формирования цветоощущения. Спектральные и дополнительные цвета. Ахроматические и хроматические цвета. Характеристики цвета: цветовой тон, светлота, насыщенность. Аддитивный и субтрактивный синтез цвета. Дефекты цветного зрения у человека.

Количественная характеристика цвета и цветовых различий окрашенных материалов. Векторное представление цвета. Треугольник Максвелла. Цветовой график МКО XYZ. Функции сложения цветов стандартного наблюдателя, их физический смысл. Определение координат цветности. Недостатки диаграммы МКО XYZ, цветовое пространство Манселла, колориметрическая система МКО Lab-76.

Избирательное поглощение света как основная причина окраски органических соединений. Спектральный способ регистрации поглощенного света и спектральная терминология. Объединенный закон Ламберта-Бугера-Бэра, его вывод, отклонения от закона. Влияние формы спектральной полосы на цвет. Спектры, содержащие несколько полос. Основные типы электронных переходов в молекулах органических хромофоров.

Применение орбитального подхода для анализа светопоглощающих свойств органических соединений. Альтернантные и неальтернантные  $\pi$ -системы. Физический смысл альтернантности. Теорема парности. Типы возмущений при образовании  $\pi$ -систем и их влияние на энергию  $\pi$ -МО. Особенности поглощения света полиенами, симметричными цианиновыми красителями и ароматическими углеводородами. Электронные переходы в гетероароматических молекулах, относящихся к четным и нечетным альтернантным системам. Использование метода ВМО для объяснения спектральных эффектов, связанных с введением в молекулу поляризующих заместителей, возникновением конкурирующих цепей сопряжения и проявлением стерических эффектов.

Образование возбужденных состояний и пути их дезактивации. Процессы излучательные и безызлучательные, моно- и бимолекулярные, фотохимические реакции. Мономолекулярные фотофизические процессы на диаграмме Яблонского. Колебательная релаксация (КР) и внутренняя конверсия (ВК). Характеристическое время ВК и КР, золотое правило Ферми.

Флуоресценция. Запись стационарных спектров испускания и возбуждения флуоресценции, блок-схема спектрофлуориметра. Важнейшие параметры спектров испускания органических флуорофоров: стоксов сдвиг и квантовый выход. Зеркальная симметрия спектров испускания и поглощения, правило Левшина и исключения из него. Правило Каши и Вавилова. Кинетика затухания флуоресценции. Экспериментальное определение времени жизни возбужденного состояния, метод счета единичных фотонов. Кажущееся и излучательное время жизни, уравнение Стриклера-Берга.

Спонтанное и вынужденное испускание фотовозбужденных состояний. Схемы достижения инверсии заселенности возбужденного и основного состояния молекул. Принципиальное устройство и особенности генерации излучения в лазерах на растворах органических красителей. Эксимерные лазеры.

Интеркомбинационная конверсия, скорость процесса и факторы, способствующие интеркомбинационным переходам (ИКП). Правило Эль-Сайеда. Эффективность ИКП в карбонильных соединениях с различным относительным расположением синглетных и триплетных уровней энергии  $\pi, \pi^*$ - и  $n, \pi^*$ -возбужденных состояний. Фосфоресценция. Отличие процессов испускания фосфоресценции и флуоресценции. Методы стимулирования фосфоресценции органических люминофоров, конструкции фосфороскопов. Замедленная флуоресценция *E*- и *P*-типа.

Взаимосвязь флуоресценции с молекулярной структурой: влияние длины и топологии сопряженной системы, влияние гетероатомов и поляризующих заместителей, влияние стерических факторов и микроокружения флуорофора. Систематика люминесцентных типов молекул на основе относительного расположения  $\pi, \pi^*$ - и  $n, \pi^*$ -уровней. Спектрально-люминесцентные свойства ароматических углеводородов, азотистых гетероциклов, ароматических нитро- и карбонильных соединений. Флуоресцентные производные ди- и триарилметановых красителей. Соединения, подвергающиеся внутримолекулярному переносу заряда (ICT) и образованию скрученных состояний с переносом заряда (TICT). Флуоресцентные ICT-хемосенсоры, молекулярные роторы.

Влияние растворителя на спектры флуоресценции. Специфическая и неспецифическая сольватация. Активация флуоресценции соединений с близким расположением  $\pi, \pi^*$ - и  $n, \pi^*$ -уровней энергии возбужденных состояний в полярных протонных растворителях. Влияние полярности растворителя и его способности к образованию водородных связей на интенсивность и положение максимума эмиссионной полосы флуорофоров ICT-типа. Уравнение Липперта-Матаги и его практическое применение. Флуоресцентные индикаторы полярности среды, используемые в биохимических исследованиях (PRO DAN и его производные, аминосульфокислоты нафталина).

Тушение возбужденных состояний и тушение люминесценции путем столкновений молекул. Динамическое тушение, основные механизмы, кинетика Штерна-Фольмера. Практическое использование динамического тушения (изучение структуры биомолекул, флуоресцентные

хемосенсоры, барометрические краски). Статическое тушение флуоресценции, образование нефлуоресцирующего комплекса в основном состоянии. Сфера активного тушения. Одновременное статическое и динамическое тушение.

Фотоиндуцированный перенос электрона (PET). Изменение окислительно-восстановительных свойств молекул при переходе в возбужденное состояние. Окислительный и восстановительный перенос электрона. Темодинамическая эффективность PET-процесса, уравнение Рэма-Уэллера. Оценка константы скорости переноса электрона, теория Маркуса и Хаша. Зависимость эффективности PET-взаимодействия от расстояния между донором и акцептором электрона. Флуоресцентные PET-сенсоры на катионы и анионы.

Образование эксимеров и эксиплексов. Особенности полос испускания, структура и характер связи в эксимерах и эксиплексах, экситонный и зарядовый резонанс. Статические и динамические эксимеры, стэкинг-взаимодействие. Пути диссипации энергии возбуждения в эксимерах и эксиплексах. Образование комплексов с переносом заряда (КПЗ), отличие эксиплексов от КПЗ.

Фотоиндуцированный перенос протона. Изменение кислотно-основных свойств молекул в возбужденном состоянии. Примеры pH-зависимой флуоресценции ароматических гидроксисоединений, азотистых гетероциклов пиридинового типа, ароматических карбоновых кислот, обусловленной фотопереносом протона. Определение значения  $pK_a^*$  возбужденного состояния, цикл Фёрстера. Внутримолекулярный перенос протона в возбужденном состоянии (ESIPT). Флуоресцентные хемосенсоры и УФ-абсорберы, функционирующие на основе ESIPT-механизма.

Перенос энергии электронного возбуждения. Радиационный и резонансный перенос (RET), сходства и различия. Экспериментальное определение квантовой эффективности RET. Квантово-механическое описание RET-процесса. Индукционно-резонансный (кулоновский) механизм Фёрстера (FRET), влияние расстояния между хромофорами и их взаимной ориентации в пространстве на константу скорости FRET-взаимодействия, критический радиус Фёрстера. Использование индукционно-резонансного переноса энергии в качестве инструмента для определения расстояний на молекулярном уровне, а также в качестве механизма, обеспечивающего переключение флуоресцентных характеристик в ратиометрических FRET-хемосенсорах.

Обменно-резонансный перенос энергии (механизм Декстера), факторы, влияющие на его эффективность. Отбор переходов по спине при обменном и кулоновском взаимодействии, правило сохранения спина Вигнера. Триплет-триплетный перенос и триплетная аннигиляция. Основные требования, предъявляемые к триплетным фотосенсибилизаторам. Регистрация образования триплетных состояний с использованием метода импульсного флэш-фотолиза. Тушение синглетных и триплетных возбужденных состояний молекулярным кислородом. Синглетный кислород, особенности его электронного строения и методы генерации. Роль синглетного кислорода в процессах фотоослабления окрашенного волокна. Синтетическая фотохимия синглетного кислорода. Фотодинамическая терапия онкологических заболеваний.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>5,0</b>	<b>180</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,89</b>	<b>68</b>
Лекции (Лек)	0,25	9
Практические занятия (ПЗ)	1,64	59
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,11</b>	<b>76</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>5,0</b>	<b>135</b>
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>1,89</b>	<b>51,0</b>
Лекции (Лек)	0,25	6,75
Практические занятия (ПЗ)	1,64	44,25



<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,11</b>	<b>57,0</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

**Аннотация рабочей программы дисциплины  
«Химия фотоактивных хромофорных соединений» (Б1.В.06)**

**1. Цель дисциплины** – обеспечить знаниями по основным типам, строению и фотоактивируемыми свойствами основных классов хромофорных систем. Обеспечить знанием синтетических путей получения хромофорных систем, возможностями управления фотохимическими и фотофизическими свойствами за счет вариации структуры хромофоров и введением подходящих заместителей в них. Обеспечить информацией по основным областям применения фотоактивных хромофорных систем. Научить планировать, организовывать и осуществлять подбор хромофорных систем для определенных применений и разрабатывать подходы к их синтезу.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими *общепрофессиональными* (ОПК) и *профессиональными* (ПК) компетенциями:

- готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-1);
- готовностью к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности (ОПК-5);
- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2).

*Знать:*

- основные классы хромофорных систем;
- методы получения наиболее важных классов хромофоров;
- основные процессы, протекающие при фотооблучении в хромофорных системах;
- основные методы управления свойствами фотоактивных хромофорных систем;
- основные области применения фотоактивных хромофорных систем;
- основные тенденции развития химии фотоактивных хромофорных систем.

*Уметь:*

- проводить анализ возможных фотоактивируемых процессов на основе структуры и состава органических хромофора;
- предложить синтетические подходы к получению различных типов хромофорных систем;
- предложить методы физико-химического анализа для выявления фотоиндуцированных свойств хромофорных систем;
- предложить и обосновать подходящий тип фотоактивных хромофорных систем для конкретных практических применений.

*Владеть:*

- знаниями о структуре и свойствах фотоактивных хромофорных систем;
- методологическими подходами к получению фотоактивных хромофорных систем;
- методами анализа структуры фотоактивных хромофорных систем;
- способностью и готовностью к освоению новых методов получения и анализа фотоактивных хромофорных систем.

**3. Краткое содержание дисциплины**

Предмет и методы дисциплина Фотоактивные хромофорные системы. Задачи и место курса в подготовке магистранта техники и технологии.

Предмет и методы физико-химических исследований органических веществ. Задачи и место курса в подготовке магистранта техники и технологии.

Основные типы хромофорных систем. Основные фотоактивируемые процессы, протекающие в хромофорных системах. Химия хромофоров. Технология хромофоров.

Флуорофоры. Влияние структурных факторов в органической молекуле на возникновение флуоресценции. Классификация флуорофоров. Полифенилены. Флуорофоры на основе пятичленных и шестичленных гетероциклических соединений. Скварелиевые, крокониевые красители. Хиноны, индоанилины в качестве флуорофоров. Флуорофоры, испускающие в ИК-области. Фолдамеры. Агрегаты красителей. Сольватохромизм.

Применение флуорофоров в дефектоскопии, лазерах, органических сцинтилляторах, в качестве отбеливателей, в составе дисков оптической записи информации.

Флуорофоры в медицине и биологии. Флуоресцентная спектроскопия биологических соединений. Флуоресцентные таймеры. Флуоресцентные метки, зонды, маркеры. Флуоресцентная рулетка. Секвенирование ДНК. Флуоресцентные молекулярные маяки. Взаимодействие хромофоров с ДНК. Флуоресценция в медицине: флуоресценция крови, тканей, биожидкостей. Оптическая томография.

Порфирины. Методы получения: выделение из природного материала, синтетические методы макроциклизации, функционализация. Фталоцианины. Методы получения металлопорфиринов. Двухпалубные, многопалубные комплексы. Физические свойства порфиринов, фталоцианинов. Порфириновые системы в качестве катализаторов. Электрохромные свойства порфиринов. Соединения для оптической записи информации. Фотодинамическая терапия рака. Синтетические модели порфиринов как модели изучения переноса электрона и энергии при фотосинтезе. Использование порфириновых производных в хроматографии, аналитической химии.

Комплексные и металлоорганические соединения, обладающие флуоресцентными свойствами. Электронные переходы в координационных соединениях. Комплексы s-, p-, d- металлов. Основные способы управления фотолюминесцентными характеристиками

флуоресцентных комплексов s-, p-, d- элементов. Электролюминесценция. Материалы, используемые в электролюминесцентных устройствах. Координационные соединения редкоземельных элементов (РЗЭ). Ван и Кросби классификация ионов лантанидов. Пути синтеза комплексных соединений лантаноидов. Лантанидный флуоресцентный анализ. FRET-биосенсоры на основе лантанидов. Иммунофлуоресцентный анализа биоспецифических взаимодействий. Комплексы рутения, рения и осмия: синтез, фотофизические свойства, использование в качестве сенсбилизаторов в солнечных батареях, системах искусственного фотосинтеза, электрохромных устройствах.

Фотохромные молекулярные системы. Характеристика фотохромов. Типы фотохромных соединений. Спирогидроиндолизины. Спиропираны. Спиронафтоксазины. Бензо- и нафтопираны. Дигетарилэтены. Методы получения, фотохромные реакции, влияние структуры и природы заместителей на фотохромные характеристики. Термохромизм. Фотодеградация. Использование фотохромных соединений в биологии, медицине. Применение фотохромов в качестве элементов оптической памяти. Фото-переключатели.

Стильбены. Стириловые красители. Методы получения, химические реакции. Фотохимические реакции. Использование стириловых производных в качестве фотоактивных компонент в оптоэлектронных устройствах, в электролюминесцентных устройствах, в лазерах, нелинейно-оптических материалах. Использование стириловых производных в биологии и медицине.

Полиметиновые (цианиновые) красители. Структура, методы получения. Фотофизические свойства. Использование в биологии.

Нелинейно-оптические свойства полиметиновых красителей, металлокомплексов, фотохромных соединений.

Химические сенсоры. Устройство химических сенсоров. Оптические сенсоры. Механизмы возникновения оптического сигнала. Электрохимические сенсоры. Технологические сенсорные устройства. Сенсоры для биохимии. Оптоды. Одноразовый оптодный материал. Оптодные планшеты.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>5,0</b>	<b>180</b>

<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>1,42</b>	<b>51</b>
Лекции (Лек)	0,28	10
Практические занятия (ПЗ)	1,14	41
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>3,58</b>	<b>129</b>
Реферат	1,25	45
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,33	84
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	-	<b>Зачет с оценкой</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астрон. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>5,0</b>	<b>135</b>
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>1,42</b>	<b>38,25</b>
Лекции (Лек)	0,28	6,75
Практические занятия (ПЗ)	1,14	31,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>3,58</b>	<b>96,75</b>
Реферат	1,25	22,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,33	63
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	-	<b>Зачет с оценкой</b>

### Аннотация рабочей программы дисциплины «Супрамолекулярная химия» (Б1.В.07)

**1. Цель дисциплины** – развитие у обучающихся навыков анализа молекулярно-организованных систем, умения построения ансамблей органических молекул, органо-неорганических комплексов и координационных полимерных структур, исследования процессов высокоспецифичного распознавания, реагирования, катализа.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими профессиональными (ПК) компетенциями:

- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);

*Знать:*

- основные типах органических молекул – базовых элементов построения молекулярно-организованных систем;
- методы анализа структуры и свойств супрамолекулярных систем; основные типы современных систем, используемых в биохимии;
- основные типы систем, используемых в органической фотонике;
- другие области применения молекулярно-организованных систем.

*Уметь:*

- проводить анализ научно-технической литературы в области современных и перспективных видов молекулярно-организованных систем;
- формулировать требования к материалам и определять эффективные пути создания новых супрамолекулярных систем с комплексом заданных свойств для конкретных областей применения;
- проводить экспериментальные исследования состава, структуры и свойств молекулярно-организованных систем;
- применять теоретические знания по современным и перспективным видам супрамолекулярным системам для решения исследовательских и прикладных задач, в том числе в междисциплинарных областях.

*Владеть:*

- методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и технологическим аспектам материаловедения на основе молекулярно-организованных систем;
- методологическими подходами, особенностями синтеза и выявления взаимосвязей состава, структуры, свойств и технологии супрамолекулярных систем, обеспечивающими обоснованное принятие решений при разработке новых материалов для различных областей применения;
- методами критического анализа и оценки современных научных достижений, разработки подходов к решению исследовательских и практических задач в области молекулярно-организованных систем;
- способностью и готовностью к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химии организованных систем с учетом правил соблюдения авторских прав.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

Основные принципы построения супрамолекулярных систем. Основные типы межмолекулярных взаимодействий. Принципы и законы построения функциональных ансамблей, содержащих различные компоненты – органические, неорганические, биологические. Основные методы физико-химического анализа супрамолекулярных систем.

Основные методы синтеза лигандов - базовых компонентов супрамолекулярных систем. Основные типы, конструктивные особенности и принцип работы основных типов супрамолекулярных систем. Методы идентификации и количественного определения основных типов систем. Области применения супрамолекулярных систем.

Процессы, моделирующие биохимические реакции, с участием супрамолекулярных подходов. Методы биохимического анализа, построенные с участием молекулярно-организованных систем. Основные принципы стратегии флуоресцентного биохимического анализа.

Основные законы преобразования света в супрамолекулярных системах.

Системы с переносом заряда, электрона и энергии в промышленности.

Явление фотохромизма, его особенности в организованных ансамблях и практическое применение. Основные принципы построения, характеристики и функционирования молекулярных машин.

Основные подходы к получению гибридных наноструктурированных материалов.

Основные характеристики наносистем, перспективы их применения.

### **4. Объем учебной дисциплины**

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>5,0</b>	<b>180</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>51</b>
Лекции (Лек)	0,25	9
Практические занятия (ПЗ)	1,17	42
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,58</b>	<b>93</b>
Реферат	0,5	18
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,08	75
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>5,0</b>	<b>135</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>38,25</b>
Лекции (Лек)	0,25	6,75
Практические занятия (ПЗ)	1,17	31,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,58</b>	<b>69,75</b>
Реферат	0,5	13,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	2,08	56,25

Вид контроля: зачет / экзамен	1,0	Экзамен (27)
-------------------------------	-----	--------------

#### 4.4.3 Дисциплины вариативной части (дисциплины по выбору)

##### Аннотация рабочей программы дисциплины

##### «Физико-химические методы исследования органических соединений» (Б1.В.ДВ.01.01)

**1 Цель дисциплины** – научить основам современных методов анализа органических веществ и приборов современной техники. Обеспечить понимание возможностей физико-химических методов, их точности, чувствительности, локальности и применимости для изучения органических веществ. Научить планировать, организовывать и проводить физико-химические исследования, обрабатывать и анализировать получаемую информацию.

**2 В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими профессиональными (ПК) компетенциями:

- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2).

*Знать:*

- о физике электромагнетизма и спектральных методах анализа;
- о корпускулярно-волновом дуализме, распределении спектральных методов по энергиям и длинам волн;
- о колебательных и электронных квантовых переходах
- о природе спинового резонанса и методах ЯМР;
- физические основы масс-спектрометрии, метода ИК-спектроскопии, ВЭЖХ с различными видами детекции, электрохимических методов анализа;
- особенности структурного анализа органических соединений при совместном использовании спектральных методов.

*Уметь:*

- проводить анализ структуры и состава органических соединений по данным УФ-, ИК, ЯМР- и масс-спектрометрии;
- выявлять характеристичные группы в органических молекулах на основе ИК-спектроскопии;
- проводить анализ фотовозбужденных состояний молекулы красителя на основе данных флуоресцентной спектроскопии с временным разрешением;
- проводить подбор метода масс-спектрометрии с подходящим видом ионизации для определенных категорий соединений;
- проводить выбор методов электрохимического анализа в зависимости от исследуемого соединения.

*Владеть:*

- физическими основами инструментальных методов анализа: ультрафиолетовой, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии ядерного магнитного резонанса и масс-спектрометрии;
- методологическими подходами электрохимического анализа;
- методами анализа структуры соединений на основе совокупности нескольких физико-химических методов;
- способностью и готовностью к освоению новых методов физико-химических исследований и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности.

##### **3. Краткое содержание дисциплины**

Предмет и методы физико-химических исследований органических веществ. Задачи и место курса в подготовке магистранта техники и технологии.

Место метода ЯМР среди других методов исследования вещества. Электромагнитное излучение. Спектры поглощения и спектры излучения. Спектральные области. Условия отбора ядер для метода ЯМР. Условие возникновения резонанса. Время релаксации. Химический сдвиг. Протонный

магнитный резонанс. Эталоны и шкалы, используемые в методе ПМР. Растворитель и его влияние на ПМР спектры. Конусы анизотропии. Спин-спиновое взаимодействие. Понятие о химически-эквивалентных и магнитно-эквивалентных ядрах. Значения констант спин-спинового взаимодействия. Меры, помогающие расшифровать спектры высшего порядка. Динамические эффекты в ПМР спектрах. Практические примеры расшифровки ПМР спектров. ЯМР спектроскопия на других ядрах.  $^{13}\text{C}$ -ЯМР спектроскопия.  $^{19}\text{F}$ -ЯМР спектроскопия.  $^{31}\text{P}$ -ЯМР спектроскопия.

Основы теории взаимодействия излучения с атомами и молекулами. Вероятности переходов. Полуклассическая теория взаимодействия излучения с веществом на основе теории возмущений, зависящих от времени. Дипольное приближение. Константы скорости переходов для различных атомно-молекулярных движений. Спонтанные и вынужденные переходы. Коэффициенты Эйнштейна, время жизни в возбужденном состоянии. Сила осцилляторов. Сила перехода. Спин электрона. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой (УФ) областях. Эмиссионная УФ спектроскопия как метод исследования двухатомных молекул. Вероятности переходов между электронно-колебательно-вращательными состояниями. Принцип Франка-Кондона. Определение энергии диссоциации и других молекулярных постоянных. Абсорбционная спектроскопия в видимой и УФ областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Классификация и отнесение электронных переходов. Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора и нарушения запрета.

Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализе. О специфике электронных спектров поглощения различных классов соединений. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях.

Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Основные характеристики люминесценции (спектры поглощения и спектры возбуждения, времена жизни возбужденных состояний, квантовый и энергетический выход люминесценции). Закономерности люминесценции (закон Стокса-Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции. Практическое использование количественного люминесцентного анализа. Просвечивающая электронная микроскопия. Растровая электронная микроскопия.

Квантово-механический подход к описанию колебательных спектров. Уровни энергии, их классификация, фундаментальные, обертоновые и составные частоты. Интенсивность полос колебательных спектров. Правила отбора и интенсивность в ИК поглощении и в спектрах КР. Классическая задача о колебаниях многоатомных молекул. Частоты и формы нормальных колебаний молекул. Выбор модели. Естественные координаты. Коэффициенты кинематического взаимодействия. Силовые постоянные. Учет симметрии молекулы. Симметрия нормальных колебаний, координаты симметрии. Анализ нормальных колебаний молекулы по экспериментальным данным. Сопоставление ИК и КР спектров и выводы о симметрии молекулы. Характеристичность нормальных колебаний. Ограничения концепции групповых частот. Определение силовых полей молекулы и проблема их неоднозначности. Использование изотопических разновидностей молекул. Корреляция силовых постоянных с другими параметрами и свойствами молекул. Применение методов колебательной спектроскопии для качественного и количественного анализов и другие применения в химии. Специфичность колебательных спектров. Исследования динамической изомерии, равновесий, кинетики реакций. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР, преимущества лазерных источников возбуждения.

Масс-спектрометрия: общие принципы и отличия различных масс-спектрометрических методов, масс-спектрометр и масс-спектр, основные характеристики масс-спектрометров. Различные примеры применения масс-спектральных методов. Способы ионизации, используемые в масс-спектрометрии. Типы ионов, образующихся в экспериментальных масс-спектрах. Метастабильные и перегруппировочные ионы. Основные отличия методов ионизации электронным ударом и химической ионизации. Устойчивость ионов. Статические и динамические масс-спектрометры. Масс-спектрометрический анализ твердых образцов. Качественный и количественный масс-спектральный анализ многокомпонентных смесей. Хромато-масс-спектрометрия (принципы и

применения для анализа лекарственных препаратов и биологических объектов). Применение масс-спектральных методов определения термодинамических характеристик гетерогенных реакций с участием газовой фазы. Полимеризация в парах. Высокотемпературная масс-спектрометрия. Tandemная масс-спектрометрия и области её применения. Магнитные свойства веществ (природа диамагнетизма и природа парамагнетизма, магнитная восприимчивость, магнитная проницаемость, экспериментальное определение магнитной восприимчивости. Эффект Зеемана для свободной парамагнитной частицы, явление ЭПР. Простой спектр ЭПР, условия резонанса. Тонкая структура спектров ЭПР, g-фактор. Сверхтонкая структура спектров ЭПР, правила отбора, распределение интенсивностей в спектре ЭПР (СТС), треугольник Паскаля. Явление ЯМР. Тонкая и сверхтонкая структура спектров ЯМР, правила отбора. Примеры спектров различных веществ. Метод ЯКР. Характеристическое время физических методов исследования. Возможности методов масс-спектрометрии, ЭПР и ЯМР в структурных, кинетических и термодинамических исследованиях. Релаксационные процессы, их влияние на интенсивность, ширину и форму линий в спектрах ЭПР и ЯМР, аномальные спектры. Модификации метода ЭПР. Применения методов масс-спектрометрии ЭПР и ЯМР в решении проблем химии окружающей среды, в экологии человека.

Механизм хроматографического разделения. Устройство хроматографа. Схема работы газового хроматографа. Схема работы жидкостного хроматографа. Принципы работы газового хроматографа. Типы хроматографических колонок. Открытые капиллярные колонки. Влияние параметров колонки на оптимизацию ГХ-методик. Уникальные особенности ГХ 6890 (7890). Совершенная система управления потоками газов. Отличия ВЭЖХ от ЖХ.

Основы теории высокоэффективной жидкостной хроматографии. Основные понятия и особенности метода. Основные величины, характеризующие хроматографическое разделение. Критерий разделения и их связь с эффективностью и селективностью. Основные типы жидкостных хроматографических систем и их применение. Применение различных типов жидкостной хроматографии для разделения соединений различных молекулярных масс и полярности. Основные узлы хроматографической системы. Системы подачи растворителей. Системы ввода образца. Колонки. Блоки контроля температуры. Детекторы. Методические аспекты ВЭЖХ. Методика подбора стационарной фазы. Общий подход к выбору подвижной фазы. Основные свойства растворителей, применяемых в ВЭЖХ и их совместимость. Оценка пригодности хроматографической системы. Особенности пробоподготовки при реализации метода ВЭЖХ. Программы обработки хроматографических данных.

Сущность поляриметрического метода анализа. Оптически активные вещества. Получение плоскополяризованного света. Явление двойного лучепреломления. Призма Николя. Явление дихроизма. Поляроды. Применение поляриметрии. Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света и его зависимость от различных факторов. Количественная оценка вращения плоскости поляризации плоскополяризованного света. Удельное и молярное вращение плоскости поляризации света. Определение концентрации оптически активных веществ в растворе. Аппаратура для поляриметрических измерений.

Принцип метода. Классификация и характеристика электродов. Индикаторные электроды и электроды сравнения. Виды потенциометрии. Потенциометрическое титрование. Сущность метода. Кривые потенциометрического титрования (интегральные, дифференциальные, кривые титрования по методу Грана). Применение потенциометрического титрования. Принцип метода прямой потенциометрии (ионометрии). Определение концентрации анализируемого раствора в прямой потенциометрии (метод градуировочного графика, метод стандартных добавок). Применение прямой потенциометрии.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>144</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,95</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	0,28	10
Практические занятия (ПЗ)	0,67	24
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,05</b>	<b>74</b>

Реферат	0,5	18
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,55	56
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астрон. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,95</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	0,28	6,75
Практические занятия (ПЗ)	0,67	18,75
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,05</b>	<b>55,5</b>
Реферат	0,5	13,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,55	42
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

**Аннотация рабочей программы дисциплины  
«Дополнительные разделы квантовой химии» (Б1.В.ДВ.01.02)**

**1. Цель дисциплины** – углубление знаний, умений, владений и формирование компетенций в области систематического подхода к рассмотрению реакционной способности и физико-химических свойств органических соединений на основании электронных представлений в рамках теории молекулярных орбиталей. Углубление знаний о теоретических методах расчёта электронного строения органических соединений. Формирование навыков практического использования полуэмпирических методов молекулярных орбиталей с применением ЭВМ.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими профессиональными (ПК) компетенциями:

- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2).

*Знать:*

- подходы к анализу реакционной способности и физико-химических свойств органических соединений;
- современные представления об электронном строении органических соединений, базирующиеся на теории молекулярных орбиталей;
- теоретические методы расчета электронного строения органических соединений.

*Уметь:*

- интерпретировать реакционную способность и физико-химические свойства органических соединений в рамках теории молекулярных орбиталей.

*Владеть:*

- навыками практического использования полуэмпирических методов молекулярных орбиталей и методов молекулярной механики с применением программ для ЭВМ.

**3. Краткое содержание дисциплины**

Методы молекулярных орбиталей и молекулярной механики – два основных способа расчёта свойств органических соединений.

Метод молекулярных орбиталей и его связь с классической теорией строения органических соединений и электронными представлениями в органической химии.

Линейные операторы и их свойства. Матричное представление линейных операторов. Матрица оператора Гамильтона.

Приближённые решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы (вариационный метод и метод возмущений) и границы их применения



Приближение Борна–Оппенгеймера. Остов молекулы. Электронный гамильтониан. Оценка погрешности, вносимой приближением Борна–Оппенгеймера.

Энергия межэлектронного взаимодействия и способы её учёта. Одноэлектронный характер молекулярных орбиталей. Остовный и кулоновский интегралы. Итерационный метод решения уравнений Хартри.

Учёт спина электрона. Детерминантная запись молекулярной волновой функции. Понятие спин-орбитали. Электронные конфигурации и электронные состояния. Мультиплетность состояния. Метод Хартри – Фока для систем с закрытой оболочкой. Кулоновский и обменный интегралы; их физическая интерпретация. Уравнения Хартри–Фока и структура матрицы оператора Фока. Энергии орбиталей и полная энергия системы в приближении Хартри–Фока.

Молекулярная орбиталь – линейная комбинация базисных атомных орбиталей. Ортонормированный базисный набор. Уравнения Хартри–Фока–Рутаана для систем с закрытой и открытой оболочками. Неограниченный метод Хартри – Фока. Электронные корреляции. Методы конфигурационного и многоконфигурационного взаимодействия.

Выбор базисных атомных функций. Типы базисных наборов: полный, валентный, расширенный. Способы задания базисных атомных орбиталей. Водородоподобные орбитали. Орбитали Хартри – Фока. Орбитали Слэтера. Гауссовы функции. Базисные наборы Попла. Зависимость размерности молекулярного базиса от типа и способа задания базисного набора.

Приближенные методы решения уравнения Шредингера (блок – схема). Расчёты *ab initio*; их достоинства и недостатки.

Метод молекулярных орбиталей Хюккеля (МОХ). Физические основы метода МОХ. Основные уравнения и их связь с уравнениями Рутаана. Кулоновский и резонансный интегралы. Параметризация в методе МОХ. Составление векового определителя. Расчёт энергий молекулярных орбиталей и коэффициентов в разложении МО ЛКАО. Интерпретация результатов расчёта. Матрица коэффициентов, матрица плотности; электронные плотности и заряды на атомах, порядки связей. Представление результатов расчётов. Молекулярная диаграмма. Графическое представление молекулярных орбиталей. Типы молекулярных орбиталей: связывающие, несвязывающие, разрыхляющие. Молекулярно – орбитальные характеристики линейных (этилен, бутадиен и т.д.) и циклических (циклобутадиен, бензол и т.д.) полиенов. Ароматические и анти-ароматические системы. Квантовохимическое обоснование правила ароматичности (правила Хюккеля).

Альтернантные и неальтернантные углеводороды. Теорема парности. Вид несвязывающей МО. Конденсированные углеводороды. Распределение электронной плотности в радикале (анионе, катионе) нечётного альтернантного углеводорода.

Системы с гетероатомом (формальдегид, пиридин, пиррол, анилин). Влияние ге-тероатома на вид и положение молекулярных орбиталей (сравнение с изоэлектронными углеводородами).

Границы применения метода МОХ. Учёт свойств реальных молекулярных систем путём подбора параметров. Использование экспериментальных методов (фотоэлектронная спектроскопия, электронная спектроскопия и т.д.) для подбора параметров в методе МОХ. Параметры Стрейтвизера.

Понятие о групповых (фрагментарных) орбиталях. Качественная теория молекулярных орбиталей.

Метод Паризера – Парра – Попла (ППП). Модель нулевого дифференциального перекрытия (НДП). Физические основы метода ППП. Основные уравнения метода ППП и их связь с уравнениями Рутаана. Построение матрицы фокиана в методе ППП. Интегралы остова. Одноцентровые и двухцентровые кулоновские интегралы. Резонансный интеграл. Параметризация в методе ППП. Использование метода ППП для расчёта электроновозбуждённых состояний. Границы применения метода ППП.

Методы, учитывающие все валентные электроны. Физические основы метода полного пренебрежения дифференциальным перекрытием (ППДП). Основные приближения метода ППДП. Интегралы перекрытия. Понятие двухатомного и молекулярного базиса. Использование метода ППДП для расчёта основного и возбуждённых состояний. Параметризация ППДП□2. Параметризация ППДП□С. Заселённость атомов и связей. Границы применения метода ППДП. Метод частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием (ЧПДП) и его модификации. Особенности параметризации. Область применения метода ЧПДП. Современные методы,

основанные на приближении НДП и их использование для расчёта электронного строения и свойств органических соединений.

Фотоэлектронная спектроскопия как экспериментальный метод оценки адекватности расчётных данных. Теорема Купманса. Использование квантово-химических методов для анализа ИК-спектров и спектров ЯМР. Расчёт частот нормальных колебаний в ИК-спектрах, величин химических сдвигов и констант спин-спинового взаимодействия в спектрах ЯМР.

Квантово-химические расчёты электронных спектров поглощения. Теоретический расчёт положения максимумов поглощения в электронных спектрах методом ППДПС. Матрица конфигурационного взаимодействия. Вектор матрицы конфигурационного взаимодействия. Типы электронных переходов. Квантово-химический расчёт и экспериментальное определение силы осциллятора.

Симметрия молекул. Характеристики основных групп симметрии. Неприводимые представления точечной группы. Отнесение молекул к точечным группам. Определение симметрии орбиталей и состояний.

Разрешённые и запрещённые электронные переходы. Правила отбора по мультиплетности и симметрии. Момент перехода. Интерпретация электронных спектров поглощения ненасыщенных (этилен, бутadiен) и ароматических (бензол и его производные) соединений. Анализ электронных спектров поглощения альтернантных систем с использованием метода возмущений молекулярных орбиталей.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>144</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,95</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	0,28	10
Практические занятия (ПЗ)	0,67	24
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,05</b>	<b>74</b>
Реферат	0,5	18
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,55	56
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астрон. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>4,0</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,95</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	0,28	6,75
Практические занятия (ПЗ)	0,67	18,75
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,05</b>	<b>55,5</b>
Реферат	0,5	13,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,55	42
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

#### Аннотация рабочей программы дисциплины «Применение красителей» (Б1.В.ДВ.02.01)

**1. Цель дисциплины** – приобретение знаний, владений и формирование компетенций в области крашения водонерастворимыми красителями, печати красителей на волокнистых материалах различного состава, способов отделки окрашенных материалов для улучшения их эксплуатационных свойств, а также способах крашения кожи, меха, волокна в массе, пластмасс, резины, бумаги и других материалов, и субстанций.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими *общепрофессиональными* (ОПК) и *профессиональными* (ПК) компетенциями:

- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Знать:*

- процессы гладкого крашения не растворимыми в воде красителями;
- процессы печатания на волокнистых материалах;
- назначение и способы осуществления заключительной отделки окрашенных материалов.

*Уметь:*

- оценивать колористические свойства красителей;
- оценить устойчивость окрасок к различным видам внешних воздействий;
- применять вспомогательные химические вещества для придания специальных потребительских качеств.

*Владеть:*

- навыками работы со специальной литературой, отражающей специфику крашения различных материалов в не текстильной отрасли;
- лабораторными методиками крашения меха и кожи.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

Крашение и печатание волокнистых материалов.

Крашение красителями нерастворимыми в воде. Кубовыми, сернистыми, дисперсными. Крашение текстильных материалов путём синтеза пигментов на волокне.

Кубовые красители - это нерастворимые в воде пигменты, которые переходят в раствор под действием восстановителей в щелочной среде при повышенной температуре. На текстильных материалах получают окраски, обладающие высокой устойчивостью к стирке.

К классу кубовых красителей относятся их водорастворимые формы – кубозоли, а также промежуточные продукты для синтеза на волокне кубовых красителей – кубогены.

Сернистые красители для окрашивания волокна должны быть переведены в водорастворимые натриевые соли лейкосоединений. В виде таких солей они обладают сродством к целлюлозе. Выпускаются и водорастворимые производные сернистых красителей – это тиозоли и тиозоли БС. Тиозоли получают обработкой лейкосоединений сернистых красителей монохлоруксусной кислотой, а тиозоли БС при обработке сернистых красителей гидросульфитом натрия.

Дисперсные красители окрашивают гидрофобные искусственные и синтетические волокна, такие как ацетатные, триацетатные, полиамидные, полиэфирные, полиакрилонитрильные. В процессе крашения их применяют в виде водных суспензий. Особое значение имеет степень дисперсности. Выпускные формы дисперсных красителей в виде тонкодисперсных порошков и паст.

Принцип синтеза красителей на волокне лежит в основе получения нерастворимых гидроксиазокрасителей, фталоцианиновых и ароиленбензимидазоловых пигментов, также окисляемых красителей.

Нерастворимые гидроксиазокрасители применяют при крашении и печатании целлюлозных и гидратцеллюлозных волокнистых материалов, а также разработаны приёмы и технологии образования гидроксиазокрасителей на гидрофобных химических волокнах и на шерсти. Технологии требуют применения специальных выпускных форм полупродуктов для синтеза.

Синтез на волокне ароиленимидазоловых (диазаинденофеналевых) пигментов позволяет получать яркие окраски широкой гаммы цветов, устойчивые к действию света, органических растворителей, высоких температур и мокрых обработок. Ароиленимидазолы образуются в результате конденсации ароматических орто- и пери-дикарбоновых или тетракарбоновых кислот с ароматическими орто-диаминами в присутствии органических кислот при повышенной температуре.

Синтез на волокне фталоцианиновых пигментов, прежде всего медьфталоцианина, позволяет получать на текстильных материалах способом крашения или печати голубые окраски исключительной яркости и чистоты, обладающие высокой устойчивостью ко всем видам физико-химических воздействий.

Из окисляемых красителей, получаемых при окислении и последующей конденсации, в текстильной промышленности используется анилиновый чёрный, дающий глубокий чёрный цвет.

Применение красителей в нетекстильных отраслях промышленности (натуральной кожи, меха, пластических масс, бумаги, резины, полиграфическая печать, окрашивание пищевых продуктов, красители для чернил и паст шариковых ручек, красители в медицине).

Крашение натуральной кожи осуществляют либо растворимыми красителями, либо покрывными красками, т.е. путём образования цветной плёнки только на лицевой стороне кожи.

Заключительная отделка текстильных материалов. Малосминаемая, противоусадочная, формоустойчивая.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>51</b>
Лекции (Лек)	0,47	17
Лабораторные занятия (Лаб)	0,47	17
Практические занятия (ПЗ)	0,47	17
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>3,58</b>	<b>129</b>
Реферат	0,5	18
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	3,08	111
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>135</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>38,25</b>
Лекции (Лек)	0,47	12,75
Лабораторные занятия (Лаб)	0,47	12,75
Практические занятия (ПЗ)	0,47	12,75
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>3,58</b>	<b>96,75</b>
Реферат	0,5	13,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	3,08	83,25
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

#### Аннотация рабочей программы дисциплины «Тонкий органический синтез» (Б1.В.ДВ.02.02)

**1. Цель дисциплины** – изучение современных методов и подходов органического синтеза, а также формирование у обучающихся знаний и умений, позволяющих осуществлять как простые, так и сложные многостадийные синтезы различных органических соединений.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

Обладать следующими общепрофессиональными (ОПК) и профессиональными (ПК) компетенциями:

- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Знать:*

- современные тенденции развития и проблемы тонкого органического синтеза;
- современные тенденции развития сырьевой базы органических веществ;
- современные проблемы экологии и устойчивого развития в синтезе органических веществ.

*Уметь:*

- критически анализировать и оценивать новые научно-исследовательские достижения и гипотезы в органическом синтезе;
- обосновать выбор темы научного исследования, поставить его цели и задачи, сформулировать проблему, выбрать и применить к предмету своего исследования соответствующие методы научного познания;
- разработать схему синтеза целевого продукта, основываясь на сырьевой базе химической технологии органических веществ;
- выбрать наиболее рациональную схему синтеза целевого продукта.

*Владеть:*

- навыками систематизации литературных данных для выбора наиболее актуального направления развития научно-исследовательских и технологических работ;
- методами обработки и интерпретации экспериментальных данных.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

Общая методология тонкого органического синтеза, которая включает в себя выбор источника сырья, разработка химической схемы синтеза. Органический синтез является одним из способов развития химической науки, поскольку именно для синтеза и в ходе синтеза разрабатываются новые методы получения различных функциональных групп, исследуется относительная реакционная способность исходных веществ, выявляются определенные закономерности.

Современные теоретические аспекты химических процессов органического синтеза. Изучение свойств промежуточных и конечных продуктов с целью определения возможности их совместимости. Нахождение оптимального метода синтеза веществ путем критического отбора имеющейся информации об известных в настоящее время синтетических реакций.

Определение областей применения тонкого органического синтеза.

Лекарственные средства. Определение лекарственного средства, классификация лекарственных препаратов, превращения лекарственных препаратов в биологических системах.

Душистые вещества. Природные и синтетические душистые вещества. Примеры и использование в повседневной жизни.

Средства защиты растений. Краткая характеристика инсектицидов, пестицидов, гербицидов. Рассмотрение синтеза отдельных представителей средств защиты растений.

### **4. Объем учебной дисциплины**

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>51</b>

Лекции (Лек)	0,47	17
Лабораторные занятия (Лаб)	0,47	17
Практические занятия (ПЗ)	0,47	17
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>3,58</b>	<b>129</b>
Реферат	0,5	18
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	3,08	111
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>135</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>38,25</b>
Лекции (Лек)	0,47	12,75
Лабораторные занятия (Лаб)	0,47	12,75
Практические занятия (ПЗ)	0,47	12,75
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>3,58</b>	<b>96,75</b>
Реферат	0,5	13,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	3,08	83,25
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

**Аннотация рабочей программы дисциплины  
«Промышленная органическая химия» (Б1.В.ДВ.03.01)**

**1. Цель дисциплины** – закрепление знаний основных теоретических закономерностей, лежащих в основе наиболее распространенных процессов тонкого органического и нефтехимического синтезов и развитие у студентов навыков анализа закономерностей практического использования достижений современной органической химии с технологиями промышленных предприятий по созданию новых синтетических материалов и различных продуктов, имеющих промышленную ценность.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими профессиональными (ПК) компетенциями:

- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2).

*Знать:*

- состав, свойства, методы подготовки и переработки природного сырья, используемого в промышленной органической химии;
- важнейшие продукты основного органического синтеза и современные методы их получения;
- основные процессы и химические реакции органического синтеза;
- механизмы и условия протекания реакций, лежащих в основе важнейших процессов основного органического и нефтехимического синтеза.

*Уметь:*

- на примере конкретных реакций охарактеризовать основные химические свойства и возможные способы промышленного получения органических соединений, принадлежащих к определенному классу;
- оценивать эффективность существующих процессов переработки природного сырья и синтеза продуктов в химической и нефтехимической отрасли;
- применять полученные знания для разработки новых технологий переработки сырья и синтеза продуктов основного органического синтеза.

*Владеть:*

- навыками обработки и систематизации данных из различных информационных источников;
- принципами проведения самостоятельного информационного поиска.

**3. Краткое содержание дисциплины**

Понятие промышленной органической химии, ее цели и методы. Критерии построения технологического процесса. Оценка методов промышленного производства продуктов органического синтеза. Оборудование заводов органического синтеза. Основное сырье в промышленности органического синтеза.

Источники сырья для промышленности органического синтеза. Сельскохозяйственное и лесохимическое сырье. Крахмал. Углехимическое сырье. Нефть. Природный газ.

Реакции конденсации. Общее понятие и о реакциях конденсации. Конденсирующие реагенты. Реакции, приводящие к образованию новых циклов. Реакции конденсации с образованием новых циклов.

Производство поверхностно-активных соединений. Понятие о поверхностно-активных веществах (ПАВ). Основные понятия и терминология в химии и технологии производства и применения ПАВ. Общая характеристика ПАВ. Классификация ПАВ. Сырье для производства ПАВ. Производство основных типов ПАВ.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>3,0</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>51</b>
Лекции (Лек)	0,25	9
Практические занятия (ПЗ)	1,17	42
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,58</b>	<b>57</b>
Реферат	0,5	18
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,08	39
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет с оценкой</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>3,0</b>	<b>81</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>38,25</b>
Лекции (Лек)	0,25	6,75
Практические занятия (ПЗ)	1,17	31,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,58</b>	<b>42,75</b>
Реферат	0,5	13,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,08	29,25
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет с оценкой</b>

#### Аннотация рабочей программы дисциплины

##### «Механизмы химических реакций в ряду ароматических соединений» (Б1.В.ДВ.03.02)

**1. Цель дисциплины** – углубление знаний, умений, владений и формирование компетенций в области механизмов органических реакций в ряду ароматических соединений, взаимосвязей «структура – метод синтеза – свойства» ароматических соединений.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими профессиональными (ПК) компетенциями:

– готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2).

*Знать:*

– современное состояние теории механизмов органических реакций;

– современные физико-химические методы, используемые для установления механизмов реакций;

- основные типы механизмов реакций в ряду ароматических соединений.

*Уметь:*

- проводить анализ научной литературы в области современной органической химии;
- предполагать возможные пути протекания органической реакции на основании совокупности экспериментальных данных.

*Владеть:*

- методами работы с научно-технической, справочной литературой и электронно-библиотечными ресурсами по теоретическим и практическим аспектам органической химии;
- теоретическими основами современных физико-химических методов анализа строения и свойств органических веществ.

### 3. Краткое содержание дисциплины

Современные представления о механизмах органических реакций, а также методах их установления. Анализ кинетических и термодинамических аспектов протекания процесса в контексте механизма реакции. Механизмы основных реакций в ряду ароматических соединений (галогенирование, нитрование, нитрозирование, сульфирование, алкилирование, ацилирование, формилирование, реакция Манниха, азосочетание, классическое нуклеофильное ипсо-замещение, анион-радикальное нуклеофильное замещение, нуклеофильное кин- и теле-замещение, окислительное нуклеофильное замещение, викариозное нуклеофильное замещение, механизм ANRORC, мономолекулярное нуклеофильное замещение). Представление о переходном состоянии и интермедиатах ( $\pi$ - и  $\sigma$ -комплексы, комплексы Сервиса и Мейзенгеймера). Молекулярно-орбитальная интерпретация механизма электрофильного замещения в ароматическом ряду. Ориентирующее влияние заместителей. Факторы парциальных скоростей и факторы селективности. Активация галогенаренов в реакциях  $S_NAr$  с помощью комплексообразования с переходными металлами.

### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>3,0</b>	<b>108</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>51</b>
Лекции (Лек)	0,25	9
Практические занятия (ПЗ)	1,17	42
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,58</b>	<b>57</b>
Реферат	0,5	18
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,08	39
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет с оценкой</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>3,0</b>	<b>81</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>1,42</b>	<b>38,25</b>
Лекции (Лек)	0,25	6,75
Практические занятия (ПЗ)	1,17	31,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,58</b>	<b>42,75</b>
Реферат	0,5	13,5
Самостоятельное изучение разделов дисциплины	1,08	29,25
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет с оценкой</b>

### 4.5. Практики

**Аннотация рабочей программы учебной практики: практика по получению первичных профессиональных умений и навыков(Б2.В.01(У))**



**1. Цель учебной практики** – получение обучающимся первичных профессиональных умений и навыков путем самостоятельного творческого выполнения задач, поставленных программой практики.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Овладеть* следующими общекультурными (ОК), общепрофессиональными (ОПК) и профессиональными (ПК) компетенциями:

- готовностью действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения (ОК-2);
- способностью на практике использовать умения и навыки в организации исследовательских и проектных работ, в управлении коллективом (ОК-7);
- способностью находить творческие решения социальных и профессиональных задач, готовностью к принятию нестандартных решений (ОК-8);
- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Знать:*

- порядок организации, планирования, проведения и обеспечения научно-исследовательских работ с использованием современных технологий;
- порядок организации, планирования, проведения и обеспечения образовательной деятельности по профилю изучаемой программы магистратуры.

*Уметь:*

- осуществлять поиск, обработку и анализ научно-технической информации по профилю пройденной практики, в том числе с применением Internet-технологий;
- использовать современные приборы и методики по профилю программы магистратуры, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты;
- выполнять педагогические функции, проводить практические и лабораторные занятия со студенческой аудиторией по выбранному направлению подготовки.

*Владеть:*

- способностью и готовностью к исследовательской деятельности по профилю изучаемой программы магистратуры;
- методологическими подходами к организации научно-исследовательской и образовательной деятельности;
- способностью на практике использовать умения и навыки в организации научно-исследовательских и проектных работ;
- навыками выступлений перед учебной аудиторией.

### **3. Краткое содержание учебной практики**

Учебная практика включает этапы ознакомления с методологическими основами и практического освоения приемов организации, планирования, проведения и обеспечения научно-исследовательской и образовательной деятельности, ознакомления с деятельностью образовательных, научно-исследовательских и проектных организаций по профилю изучаемой программы магистратуры.

Конкретное содержание учебной практики определяется индивидуальным заданием обучающегося с учётом интересов и возможностей кафедры или организации, где она проводится.

Индивидуальное задание разрабатывается по профилю изучаемой программы магистратуры с учётом темы выпускной квалификационной работы.

#### 4. Объем учебной практики

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	-	-
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
Индивидуальное задание	1,0	36
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе учебной практики	5,0	180
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	-	<b>Зачет с оценкой</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>162</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	-	-
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>6,0</b>	<b>162</b>
Индивидуальное задание	1,0	27
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе учебной практики	5,0	135
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	-	<b>Зачет с оценкой</b>

#### Аннотация программы производственной практики: научно-исследовательская работа (Б2.В.02 (Н))

**1. Цель научно-исследовательской работы (НИР)** – формирование необходимых компетенций для осуществления научно-исследовательской деятельности по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология, направленной на создание новых органических соединений с ценными свойствами и разработку технологий их получения с применением современных методов исследования и средств математического, физического и компьютерного моделирования.

#### **2. В результате выполнения НИР обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК), общепрофессиональными (ОПК) и профессиональными (ПК) компетенциями:

- способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);
- готовностью действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения (ОК-2);
- готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3);
- способностью совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, получать знания в области современных проблем науки, техники и технологии, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-4);
- способностью к профессиональному росту, к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности (ОК-5);
- способностью на практике использовать умения и навыки в организации исследовательских и проектных работ, в управлении коллективом (ОК-7);
- способностью находить творческие решения социальных и профессиональных задач, готовностью к принятию нестандартных решений (ОК-8);

- готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-1);
- готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-2);
- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- готовностью к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез (ОПК-4);
- готовностью к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности (ОПК-5);
- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Подготовить и представить к защите* научно-исследовательскую работу (НИР), выполненную на современном уровне развития науки и техники и соответствующую выбранному направлению подготовки и программе обучения. В представленной к защите НИР должны получить развитие знания и навыки, полученные обучающимся при освоении программы магистратуры, в том числе при изучении специальных дисциплин. Представленная к защите НИР должна содержать основные теоретические положения, экспериментальные результаты, практические достижения и выводы из работы.

### **3. Краткое содержание научно-исследовательской работы**

#### **1. Составление плана научно-исследовательской работы.**

Литературный обзор по теме НИР. Теоретическая часть исследования. Практическая часть исследования.

#### **2. Обзор и анализ информации по теме НИР.**

Виды информации (обзорная, справочная, реферативная, ревалентная). Виды изданий (статьи, монографии, учебники, стандарты, отчеты по НИР). Методы поиска литературы (библиотечные каталоги, реферативные журналы, автоматизированные средства поиска, просмотр периодических изданий).

#### **3. Постановка цели и задач исследования.**

Объект и предмет исследования. Главная цель исследования. Задачи исследования. Необходимые требования и ограничения (временные, материальные, энергетические, информационные и др.).

#### **4. Методики проведения экспериментальных исследований.**

Критерии оценки эффективности исследуемого объекта (процесса). Параметры, контролируемые при исследовании. Перечень оборудования, установок и приборов. Условия и порядок проведения опытов. План экспериментов. Методики обработки результатов экспериментов и их анализа.

#### **5. Проведение теоретических и экспериментальных исследований.**

Этапы проведения эксперимента. Методы познания (сравнение, анализ, синтез, абстрагирование, аналогия, обобщение, системный подход, моделирование). Методы теоретического исследования (идеализация, формализация, аксиоматический метод, математическая гипотеза и др.)

#### **6. Обработка экспериментальных данных.**

Методы обработки экспериментальных данных (графический способ, аналитический способ, статистическая обработка и др.).

#### **7. Подготовка научной публикации.**

Тезисы доклада.

#### 4 Объем научно-исследовательской работы

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>42,0</b>	<b>1512</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>20,5</b>	<b>738</b>
Практические занятия (ПЗ)	20,5	738
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>20,5</b>	<b>738</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	20,5	738
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>
<b>В том числе по семестрам:</b>		
<b>1 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость в семестре</b>	<b>9,0</b>	<b>324</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>4,28</b>	<b>154</b>
Практические занятия (ПЗ)	4,28	154
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>4,72</b>	<b>170</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	4,72	170
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет с оценкой</b>
<b>2 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость в семестре</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>3,78</b>	<b>136</b>
Практические занятия (ПЗ)	3,78	136
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,22</b>	<b>80</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	2,22	80
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет с оценкой</b>
<b>3 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость в семестре</b>	<b>9,0</b>	<b>324</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>4,28</b>	<b>154</b>
Практические занятия (ПЗ)	4,28	154
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>4,72</b>	<b>170</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	4,72	170
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>-</b>	<b>Зачет с оценкой</b>
<b>4 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость в семестре</b>	<b>18,0</b>	<b>648</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>8,5</b>	<b>306</b>
Практические занятия (ПЗ)	8,5	306
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>8,5</b>	<b>306</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	8,5	306
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (36)</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>42,0</b>	<b>1134</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>20,5</b>	<b>553,5</b>
Практические занятия (ПЗ)	20,5	553,5

<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>20,5</b>	<b>553,5</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	20,5	553,5
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>
<b>В том числе по семестрам:</b>		
<b>1 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость в семестре</b>	<b>9,0</b>	<b>243</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>4,28</b>	<b>115,5</b>
Практические занятия (ПЗ)	4,28	115,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>4,72</b>	<b>127,5</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	4,72	127,5
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет с оценкой</b>
<b>2 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость в семестре</b>	<b>6,0</b>	<b>162</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>3,78</b>	<b>102</b>
Практические занятия (ПЗ)	3,78	102
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>2,22</b>	<b>60</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	2,22	60
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет с оценкой</b>
<b>3 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость в семестре</b>	<b>9,0</b>	<b>243</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>4,28</b>	<b>115,5</b>
Практические занятия (ПЗ)	4,28	115,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>4,72</b>	<b>127,5</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	4,72	127,5
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет с оценкой</b>
<b>4 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость в семестре</b>	<b>18,0</b>	<b>486</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>8,5</b>	<b>229,5</b>
Практические занятия (ПЗ)	8,5	229,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>8,5</b>	<b>229,5</b>
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе НИР	8,5	229,5
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	<b>1,0</b>	<b>Экзамен (27)</b>

#### **Аннотация рабочей программы преддипломной практики (Б2.В.03(Пд))**

**1. Цель преддипломной практики** – выполнение выпускной квалификационной работы.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК), общепрофессиональными (ОПК) и профессиональными (ПК) компетенциями:

- готовностью действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения (ОК-2);
- готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3);
- способностью на практике использовать умения и навыки в организации исследовательских и

- проектных работ, в управлении коллективом (ОК-7);
- способностью находить творческие решения социальных и профессиональных задач, готовностью к принятию нестандартных решений (ОК-8);
- готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-2);
- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- готовностью к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности (ОПК-5);
- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Знать:*

- физико-химические закономерности технологии по профилю выпускной квалификационной работы;
- экономические показатели технологии;
- комплекс мероприятий по технике безопасности, охране окружающей среды, охране труда.

*Уметь:*

- осуществлять контроль самостоятельной и коллективной научно-исследовательской работы;
- выполнять подготовку научно-технической документации для проведения научных исследований и технических разработок;
- выполнять расчеты, связанные как с разработкой заданий для отдельных исполнителей, так и с составлением планов и программ проведения научных исследований и технических разработок в целом.

*Владеть:*

- системой планирования и организации научно-исследовательских и проектных работ в рамках изучаемой программы магистратуры;
- основными должностными функциями руководящего персонала (руководителя научной группы, проекта, программы) в рамках изучаемой программы магистратуры.

### **3. Краткое содержание преддипломной практики**

Приобретение знаний и навыков по организации и управлению отдельными этапами и программами проведения научных исследований и технических разработок.

Изучение экономики и организации производства, охраны труда, охраны окружающей среды, мер техники безопасности в масштабах отделения, участка предприятия.

Подготовка исходных данных для выполнения выпускной квалификационной работы.

### **4. Объем преддипломной практики**

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	-	-
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
Индивидуальное задание	1,0	36
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе преддипломной практики	5,0	180
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	-	<b>Зачет с оценкой</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>162</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	-	-
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>6,0</b>	<b>162</b>
Индивидуальное задание	1,0	27
Самостоятельное освоение знаний, умений и навыков по программе преддипломной практики	5,0	135
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>	-	<b>Зачет с оценкой</b>

#### 4.7 Государственная итоговая аттестация

##### Защита выпускной квалификационной работы (Б.3.Б.01)

**1. Цель государственной итоговой аттестации** – выявление уровня теоретической и практической подготовленности выпускника вуза к выполнению профессиональных задач и соответствия его подготовки требованиям ФГОС ВО по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен обладать следующими компетенциями:**

*общекультурными:*

- способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);
- готовностью действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения (ОК-2);
- готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3);
- способностью совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, получать знания в области современных проблем науки, техники и технологии, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-4);
- способностью к профессиональному росту, к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности (ОК-5);
- способностью в устной и письменной речи свободно пользоваться русским и иностранным языками как средством делового общения (ОК-6);
- способностью на практике использовать умения и навыки в организации исследовательских и проектных работ, в управлении коллективом (ОК-7);
- способностью находить творческие решения социальных и профессиональных задач, готовностью к принятию нестандартных решений (ОК-8);
- способностью с помощью информационных технологий к самостоятельному приобретению и использованию в практической деятельности новых знаний и умений, в том числе в областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности (ОК-9);

*общепрофессиональными компетенциями:*

- готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-1);
- готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-2);
- способностью к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки (ОПК-3);
- готовностью к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез (ОПК-4);

- готовностью к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности (ОПК-5);

*профессиональными компетенциями, соответствующими видам профессиональной деятельности, на которые ориентирована программа магистратуры:*

- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2);
- способностью использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты (ПК-3).

*Знать:*

- принципы и порядок постановки и формулирования задач научных исследований на основе результатов поиска, обработки и анализа научно-технической информации;
- физико-химические основы синтеза высокотемпературных функциональных материалов, методы их исследования и проектирования свойств;
- правила и порядок подготовки научно-технических отчетов, аналитических обзоров и справок, требования к представлению результатов проведенного исследования в виде научного отчета, статьи или доклада;
- приемы защиты интеллектуальной собственности.

*Уметь:*

- разрабатывать новые технические и технологические решения на основе результатов научных исследований;
- создавать теоретические модели технологических процессов, позволяющих прогнозировать технологические параметры, характеристики аппаратуры и свойства получаемых веществ, материалов и изделий;
- разрабатывать программы и выполнять научные исследования, обработку и анализ их результатов, формулировать выводы и рекомендации;
- координировать работы по сопровождению реализации результатов работы в производстве.

*Владеть:*

- методологией и методикой анализа, синтеза и оптимизации процессов обеспечения качества испытаний, сертификации продукции с применением проблемно-ориентированных методов;
- навыками работы в коллективе, планирования и организации коллективных научных исследований;
- способностью решать поставленные задачи, используя умения и навыки в организации научно-исследовательских и технологических работ.

### **3. Краткое содержание государственной итоговой аттестации**

Государственная итоговая аттестация обучающихся по программе магистратуры проводится в форме защиты выпускной квалификационной работы (ВКР) – магистерской диссертации. Государственная итоговая аттестация в форме защиты ВКР проходит в 4 семестре на базе знаний, полученных студентами при изучении дисциплин направления 18.04.01 Химическая технология.

Государственная итоговая аттестация обучающихся по программе магистратуры – защита выпускной квалификационной работы проводится государственной экзаменационной комиссией.

Контроль знаний обучающихся, полученных при освоении ООП, осуществляется путем проведения защиты ВКР и присвоения квалификации «магистр».

### **4. Объем государственной итоговой аттестации**

Программа относится к базовой части учебного плана, к блоку 3 «Государственная итоговая аттестация» (Б3) и рассчитана на сосредоточенное прохождение в 4 семестре (2 курс) обучения в объеме 216 ч (6 ЗЕТ). Программа предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области химической технологии тонкого органического синтеза.

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
---------------------	---------------------	-----------------



<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>6,0</b>	<b>216</b>
Выполнение, написание и оформление ВКР	6,0	216
<b>Вид контроля: защита ВКР</b>		<b>защита ВКР</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>6,0</b>	<b>162</b>
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>6,0</b>	<b>162</b>
Выполнение, написание и оформление ВКР	6,0	162
<b>Вид контроля: защита ВКР</b>		<b>защита ВКР</b>

#### 4.8 Факультативы

##### Аннотация рабочей программы дисциплины

##### «Профессионально-ориентированный перевод» (ФТД.В.01)

**1. Цель дисциплины** – приобретение обучающимися общей, коммуникативной и профессиональной компетенций, уровень которых на отдельных этапах языковой подготовки позволяет выполнять различные виды профессионально ориентированного перевода в производственной и научной деятельности.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК) и общепрофессиональными (ОПК) компетенциями:

- готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3);
- способностью к профессиональному росту, к самостоятельному обучению новым методам исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля своей профессиональной деятельности (ОК-5);
- способностью в устной и письменной речи свободно пользоваться русским и иностранным языками как средством делового общения (ОК-6);
- готовностью к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-1);
- готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-2);
- готовностью к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи (ПК-2).

*Знать:*

- основные способы достижения эквивалентности в переводе;
- основные приемы перевода;
- языковую норму и основные функции языка как системы;
- достаточное для выполнения перевода количество лексических единиц, фразеологизмов, в том числе социальных терминов и лингвострановедческих реалий.

*Уметь:*

- применять основные приемы перевода;
- осуществлять письменный перевод с соблюдением норм лексической эквивалентности, соблюдением грамматических, синтаксических и стилистических норм;
- оформлять текст перевода в компьютерном текстовом редакторе;
- осуществлять перевод с соблюдением норм лексической эквивалентности, соблюдением грамматических, синтаксических и стилистических норм текста перевода и темпоральных характеристик исходного текста.

*Владеть:*

- методикой предпереводческого анализа текста, способствующей точному восприятию исходного высказывания;
- методикой подготовки к выполнению перевода, включая поиск информации в справочной, специальной литературе и компьютерных сетях;
- основами системы сокращенной переводческой записи при выполнении перевода;
- основной иноязычной терминологией специальности,
- основами реферирования и аннотирования литературы по специальности.

### 3. Краткое содержание дисциплины

Введение. Предмет и роль перевода в современном обществе. Различные виды перевода. Задачи и место курса в подготовке бакалавра техники и технологии.

#### Модуль 1.

1.1. Сравнение порядка слов в английском и русском предложениях. Перевод простого повествовательного предложения настоящего, будущего и прошедшего времени. Особенности перевода вопросительных и отрицательных предложений в различных временах.

1.2 Перевод предложений во временах Indefinite, Continuous. Чтение и перевод по теме «Химия».

#### Модуль 2.

2.1. Перевод предложений во временах групп Perfect, Perfect Continuous (утвердительные, вопросительные и отрицательные формы). Особенности употребления вспомогательных глаголов.

2.2 Перевод страдательного залога. Трудные случаи перевода страдательного залога. Чтение и перевод текстов по теме «Наука и научные методы». Активизация лексики прочитанных текстов.

2.3. Перевод придаточных предложений. Придаточные подлежащие. Придаточные сказуемые. Придаточные определительные. Придаточные обстоятельственные, придаточные дополнительные.

2.4. Типы условных предложений, правила и особенности их перевода. Практика перевода на примерах текстов о химии, Д.И. Менделееве, науке и технологии.

2.5. Перевод предложений с учетом правила согласования времен. Прямая и косвенная речь.

2.6. Различные варианты перевода существительного в предложении.

2.7. Модальные глаголы и особенности их перевода. Развитие навыков перевода по теме «Наука завтрашнего дня».

2.8. Специальная терминология по теме «Лаборатория».

2.9. Сокращения. Особенности их перевода. Развитие навыков перевода на примере текстов по теме «Лаборатория, измерения в химии».

#### Модуль 3.

3.1. Неличные формы глагола. Инфинитив (неопределенная форма глагола). Роль инфинитива в предложении и варианты перевода на русский язык. Причастия и герундий.

3.2. Инфинитивные обороты. Оборот дополнение с инфинитивом. Варианты перевода на русский язык. Терминология по теме «Современные технологии».

3.3. Оборот подлежащее с инфинитивом. Различные варианты перевода. Терминология по теме «Химическая технология».

3.4. Перевод причастных оборотов. Абсолютный причастный оборот и варианты перевода. Развитие навыков перевода по теме «Химическая технология».

### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>72</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	-	-
Практические занятия (ПЗ)	0,94	34
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>38</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>54</b>
<b>Контактная работа (КР):</b>	<b>0,94</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	-	-
Практические занятия (ПЗ)	0,94	25,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>28,5</b>
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет</b>

**Аннотация учебной программы дисциплины  
«Социология и психология профессиональной деятельности» (ФТД.В.02)**

**1. Цель дисциплины** – формирование социально ответственной личности, способной осуществлять критический анализ проблемных ситуаций, вырабатывать конструктивную стратегию действий, организовывать и руководить работой коллектива, в том числе в процессе межкультурного взаимодействия, рефлексировать свое поведение, выстраивать и реализовывать стратегию профессионального развития.

**2. В результате изучения дисциплины обучающийся по программе магистратуры должен:**

*Обладать* следующими общекультурными (ОК), общепрофессиональными (ОПК) и профессиональными (ПК) компетенциями:

- способностью совершенствовать и развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, получать знания в области современных проблем науки, техники и технологии, гуманитарных, социальных и экономических наук (ОК-4);
- готовностью руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия (ОПК-2);
- способностью организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей (ПК-1).

*Знать:*

- сущность проблем организации и самоорганизации личности, ее поведения в коллективе в условиях профессиональной деятельности;
- методы самоорганизации и развития личности, выработки целеполагания и мотивационных установок, развития коммуникативных способностей и профессионального поведения в группе;
- конфликтологические аспекты управления в организации;
- методики изучения социально-психологических явлений в сфере управления и самоуправления личности, группы, организации.

*Уметь:*

- планировать и решать задачи личностного и профессионального развития не только своего, но и членов коллектива;
- анализировать проблемные ситуации на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий, использовать методы диагностики коллектива и самодиагностики, самопознания, саморегуляции и самовоспитания;
- устанавливать с коллегами отношения, характеризующиеся конструктивным уровнем общения;
- вырабатывать командную стратегию для достижения поставленной цели в решении профессиональных задач.

*Владеть:*

- социально-психологическими технологиями самоорганизации и развития личности, выстраивания и реализации траектории саморазвития;
- теоретическими и практическими навыками предупреждения и разрешения внутриличностных, групповых и межкультурных конфликтов;
- способами мотивации членов коллектива к личностному и профессиональному развитию;

– способностями к конструктивному общению в команде, рефлексии своего поведения и лидерскими качествами.

### **3. Краткое содержание дисциплины**

*Модуль 1. Общество и личность: новые условия и факторы профессионального развития личности.*

1.1. Современное общество в условиях глобализации и информатизации. Типы современных обществ: общество риска, общество знания, информационное общество. Социальные и психологические последствия информатизации общества. Футурошок. Культурошок. Аномия. Адаптационные копинг-стратегии. Личность в современном обществе. Рефлексирующий индивид. Человек как субъект деятельности. Самодиагностика и самоанализ профессионального развития.

1.2. Общее понятие о личности. Личность и ее структура. Самосознание: самопознание, самоотношение, саморегуляция. Основные подходы к изучению личности. Развитие личности. Социальная и психологическая структура личности. Ценностные ориентации и предпочтения личности. Личность в системе непрерывного образования. Самообразование как основа непрерывного образования. Толерантное восприятие социальных, этнических, конфессиональных и культурных различий.

1.3. Социальные и психологические технологии самоорганизации и саморазвития личности. Темперамент и характер в структуре личности. Проявление темперамента в деятельности. Структура и типология характера. Формирование характера. Построение взаимодействия с людьми с учетом их индивидуальных различий. Стратегии развития и саморазвития личности. Личные приоритеты. Целеполагание. Ценности как основа целеполагания. Цели и ключевые области жизни. Life Managment и жизненные цели. Smart - цели и надцели. Цель и призванные обеспечить ее достижения задачи и шаги. Копинг-стратегии. Искусство управлять собой.

1.4. Когнитивные процессы личности. Общая характеристика когнитивных (познавательных) процессов личности. Ощущение и восприятие: виды, свойства, особенности развития. Внимание и память: виды, свойства, функции. Развитие и воспитание внимания. Возрастные и индивидуальные особенности памяти. Приемы рационального заучивания. Мышление и его формирование. Типология мышления: формы, виды, операции, индивидуальные особенности. Мышление и речь. Способы активизации мышления. Воображение: виды, функции, развитие. Воображение и творчество. Приемы эффективного чтения. Тренировка памяти и внимания.

1.5. Функциональные состояния человека в труде. Стресс и его профилактика. Общее понятие об эмоциях и чувствах: функции, классификация, особенности развития. Способы управления своим эмоциональным состоянием. Общее представление о воле. Психологическая структура волевого акта. Развитие и воспитание силы воли. Функциональные состояния человека в труде. Регуляторы функциональных состояний. Классификация функциональных состояний. Психологический стресс как функциональное состояние. Психология стресса. Профилактика стресса и формирование стрессоустойчивости. Методы управления функциональными состояниями.

1.6. Психология профессиональной деятельности. Человек и профессия. Структура профессиональной деятельности. Психологические направления исследования человека в структуре профессиональной деятельности. Профессиографирование как метод изучения профессиональной деятельности. Виды профессиографирования. Задачи психологии профессиональной деятельности. Психологические признаки и регуляторы труда. Профессионально важные качества.

*Модуль 2. Человек как участник трудового процесса*

2.1. Основные этапы развития субъекта труда. Человек как субъект труда: структура основных компонентов. Этапы развития субъекта труда (периодизация Е. А. Климова). Кризисы профессионального становления (Е. Ф. Зеер). Внутриличностный конфликт и способы его разрешения.

2.2. Трудовая мотивация и удовлетворенность трудом. Потребности и мотивы личности. Классификация потребностей и виды мотивации. Иерархия потребностей (пирамида А. Маслоу). Трудовая мотивация. Мотивы трудового поведения (В. Г. Подмарков). Основные теории трудовой мотивации и удовлетворенности трудом (Д. Макклеланд, Ф. Герцберг, В. Врум и др.). Мотивация поведения человека в организации. Сущность мотивации как функции управления в организации. Природа мотивации. Функции мотивов поведения человека. Мотивация и управление.

Психологические теории мотивации в организации. Социально-экономические теории мотивации. Исследования мотивации. Методики определения мотивации к успеху.

2.3. Целеполагание и планирование в профессиональной деятельности. Психологическая система трудовой деятельности. Мотивационный процесс как основа целеполагания. Этапы достижения цели. Структура мотивационного процесса. Критерии эффективности целеполагания. Классификация целей. Разработка программы реализации цели. Стратегическое планирование.

2.4. Профессиональная коммуникация. Психология общения. Составные элементы процесса общения. Функции и виды общения. Типы общения. Характеристики личности, способствующие успешности общения. Обмен информацией и коммуникативные барьеры. Авторитарная и диалогическая коммуникация. Общение как взаимодействие (интеракция). Межличностное восприятие и построение имиджа. Профессиональное общение. Культура делового общения.

2.5. Психология конфликта. Конфликт как особая форма взаимодействия. Структура, динамика, функции конфликтов. Основные стадии развития конфликтов. Классификация конфликтов. Основные этапы поиска выходов из конфликтной ситуации. Профессиональные конфликты. Источники конфликтов. Конфликтогенные личности. Условия конструктивного разрешения конфликтов. Управление конфликтными ситуациями в коллективе. Социальные технологии предупреждения и разрешения конфликтов в команде и организации.

2.6. Трудовой коллектив. Психология совместного труда. Группа. Коллективы. Организации. Понятие группы. Виды групп: условные и реальные, большие и малые, первичные и вторичные, формальные и неформальные, референтные группы. Профессиональные коллективы. Динамика формирования коллектива. Диагностика социальных групп. Групповая сплоченность. Групповая динамика. Деятельность команд в организации. Социометрия. Психология совместной трудовой деятельности. Признаки группового субъекта труда. Классификация организаций. Способ организации совместной деятельности. Психология группы. Социально-психологические особенности малой организованной группы. Социально-психологический климат группы.

2.7. Психология управления. Управление как социальный феномен. Субъект и объект управления. Управленческие отношения как предмет науки управления. Этапы ее развития. Управленческая деятельность. Основные управленческие культуры: характерные черты и особенности. Основные функции управленческой деятельности. Социально-психологическое обеспечение управления коллективом. Человеческие ресурсы организации и управленческие проблемы их эффективного использования. Проблема человека в системе управления. Личность и организация.

#### 4. Объем учебной дисциплины

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В академ. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>72</b>
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>0,94</b>	<b>34</b>
Лекции (Лек)	0,44	16
Практические занятия	0,50	18
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>38</b>
Реферат	0,34	12
Другие виды самостоятельной работы	0,72	26
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет</b>

Виды учебной работы	В зачетных единицах	В астроном. часах
<b>Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану</b>	<b>2,0</b>	<b>54</b>
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>0,94</b>	<b>25,5</b>
Лекции (Лек)	0,44	12,0
Практические занятия	0,50	13,5
<b>Самостоятельная работа (СР):</b>	<b>1,06</b>	<b>28,5</b>
Реферат	0,34	12

Другие виды самостоятельной работы	0,72	26
<b>Вид контроля: зачет / экзамен</b>		<b>Зачет</b>