

Аннотации рабочих программ специальных дисциплин подготовки аспирантов по направлению 04.06.01 Химические науки и 30.06.01 Фундаментальная медицина, реализуемых в НИОХ СО РАН

Избранные главы теоретической органической химии

Дисциплина предназначена для углубленного изучения тех разделов теоретической органической химии, которые не рассматриваются или мало освещены в основных химических курсах университетов, но знание их необходимо для понимания и оценки передовых идей и результатов современной науки и ее приоритетных направлений. Основной целью освоения дисциплины является развитие современного химического мировоззрения, приобретения ими необходимого минимума знаний о современных теоретических воззрениях, экспериментальных методах работы с веществом, а также современных приоритетных прикладных аспектах. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: ознакомление аспирантов с современными методами и приемами организации и проведения химических экспериментов; ознакомление аспирантов с достижениями современной органической химии в области синтеза соединений; ознакомление аспирантов с приоритетными направлениями практического использования органических соединений.

Материалы и их свойства

Дисциплина предназначена для обучения основам современного материаловедения. Основной целью освоения дисциплины является развитие представлений о взаимосвязи строения и функциональных свойств неорганических материалов и приобретения ими уровня знаний для мотивирования исследований в направлении создания новых материалов с перспективными свойствами. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: дать представление о методах синтеза современных функциональных материалов; дать понимание о взаимосвязи структуры материалов и их свойств.

Гетерогенные равновесия

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

Избранные главы металлоорганической химии

Целью курса является ознакомление аспирантов с общими сведениями о химии металлоорганических соединений, их применении в смежных областях (катализ и материаловедение), а также биологическом действии. Основные за-

дачи курса: изучение химии металлоорганических соединений непереходных металлов и f-элементов; знакомство с методами синтеза, свойствами и строением объектов, перспективных для создания катализаторов и получения пленочных материалов методом CVD.

Количественный элементный анализ органических веществ и материалов

Основная цель курса состоит в том, чтобы дать представление о количественных методах элементного анализа органических веществ и материалов. Рассматривается развитие методов определения основных элементов - углерода, водорода, азота, галогенов, серы – и приведены конкретные современные методики их определения. Большое внимание уделяется химическим свойствам анализируемых веществ и процессам, лежащим в основе представленных методов.

Хромато-спектрометрические методы анализа

Цель курса – познакомить аспирантов с современными достижениями гибридной хроматографии. Задачи курса – дать базовые понятия, связанные с теорией хроматографии, познакомить с принципами работы современных устройств, функционирование которых обеспечивает возможности газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии и высокоэффективной жидкостной хроматографии для решения различных аналитических задач.

Физические методы установления строения органических соединений

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

Теоретические основы органической химии

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

Методики и методология органического синтеза

Основной целью освоения дисциплины является выработка у аспиранта

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

Стереохимия органических соединений

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

Вычислительные методы в органической химии

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

Биологически активные вещества живых организмов

При прохождении курса аспиранты получают углубленные знания о структурном разнообразии и основных группах продуцентов живых организмов (высших и низших животных и растений, грибов, бактерий и некото-

рых других), способах классификации этих вторичных метаболитов, о некоторых их химических, токсикологических и других свойствах, о месте локализации в организме и способах выделения, о биологической или физиологической функции, о практическом применении этих веществ или их синтетических аналогов. Курс опирается на знание основ органической химии и классов органических соединений и является дополнением к базовой дисциплине «Органическая химия» и к некоторым другим химическим дисциплинам («биохимия», «биоорганическая химия» и т.п.).

Современные методы химической кинетики

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

Фотохимия

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

Введение в теорию химических реакций

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

Кинетика жидкофазных реакций

Цель курса – познакомить аспирантов с кинетическими особенностями реакций в жидкой фазе. Задачи курса – дать аспирантам представления о влия-

нии растворителя на кинетику химических реакций и особенностях различных типов диффузионно-контролируемых и кинетически-контролируемых реакций. Курс содержит шесть разделов: диффузионно и кинетически-контролируемые реакции, структура жидкости; межмолекулярные взаимодействия, сольватация; диффузионно-контролируемые реакции; кинетически-контролируемые реакции; влияние давления на кинетику жидкофазных реакций; элементы квантовой теории химических реакций, перенос электрона

Актуальные проблемы современной химии

Основной целью курса является анализ современного состояния исследований в наиболее актуальных областях современной химии. Курс состоит из тематических фрагментов, которые читаются ведущими специалистами научно-исследовательских институтов СО РАН.

Физическая химия биополимеров

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

Основы медицинской химии

Основной целью освоения дисциплины является приобретение знаний в области медицинской химии, в том числе изучение механизмов действия лекарственных средств на клинически значимые биохимические процессы, путей биотрансформации и методов модификации лекарственных средств; изучение строения и свойств химических соединений, входящих в состав живых организмов и участвующих в биохимических процессах.

Общая фармакология

Определение понятий фармакодинамика, рецепторы, мессенджеры, механизм действия, селективность, аффинитет экзогенных и эндогенных лигандов к различным рецепторным образованиям, стереоизомеры, полные и частичные агонисты и антагонисты, органы- и клетки-мишени. Виды действия лекарственных средств: местное, резорбтивное, прямое, рефлекторное, обратимое, необратимое, избирательное. Принципы исследования локализации и механизма действия лекарственных средств.

Биологически активные вещества живых организмов

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

плине «Органическая химия» и к некоторым другим химическим дисциплинам («биохимия», «биоорганическая химия» и т.п.).

Биоорганическая химия

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

Методы исследования биополимеров

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

Строение биополимеров

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

Физическая химия биополимеров

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

ций любой сложности, а также для понимания строения и функций биокатализаторов.

Кинетика гетерогенных каталитических реакций

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

Катализ

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

Токсикология

Основной целью курса является ознакомление аспирантов с представлениями об основных составляющих токсичности – воздействием, пребыванием токсикантов в организме, механизмами токсичности, а также представлениями о современных подходах в оценке риска неблагоприятных последствий воздействия токсикантов на здоровье. Для достижения поставленной цели выделяются задачи курса: охарактеризовать основные факторы токсического воздействия – токсические агенты, их классификация; частота, продолжительность, доза, связь дозы с эффектом. Эффект, виды токсических эффектов, варибельность

эффекта; рассмотреть этапы пребывания токсиканта в организме (абсорбция, распределение, воздействие на мишень, биотрансформация, экскреция/реабсорбция); рассмотреть механизмы первичного взаимодействия токсиканта с мишенью как основу токсических эффектов, проследить развертывание основных событий вслед за первичным взаимодействием во времени; ознакомиться с основными показателями количественного описания кинетики токсиканта в организме (клиренс и др.); ознакомиться с оценками риска токсических эффектов лабораторными и эпидемиологическими подходами.