

8D05302-Заманауи материалдардың химиясы және технологиясы білім беру бағдарламасы бойынша PhD докторантураға түсушілерге арналған эссе тақырыптары

1-тақырып. Органикалық қосылыстарды зерттеу әдістеріне кіріспе

Органикалық заттарды талдау және сәйкестендіру ұғымдары. Зерттеу әдістерінің жіктелуі: физикалық, физика-химиялық және химиялық әдістер. Заманауи аналитикалық әдістердің мүмкіндіктеріне шолу. Зерттеу мақсатына байланысты әдістерді таңдау (идентификациялау, құрылымдық талдау, сандық анықтау, тазалықты бақылау). Органикалық заттарды зерттеудің ерекшеліктері: сәйкестендіру қиындықтары, изомерия, коспалар. Қазіргі аналитикалық химиядағы кешенді тәсілдің рөлі.

2-тақырып. Элементтік талдау және молекулалық массаны анықтау

Сапалық және сандық элементтік талдау: CHN-талдау, галогендердің, күкірттің және азоттың мөлшерін анықтау. Молекулалық формуланы есептеу. Молекулалық массаны анықтау әдістері: криоскопия, эбуллиоскопия, осмометрия, масс-спектрометрия, газ фазасындағы зерттеу әдістері (GPC, MALDI-TOF).

3-тақырып. Ультракүлгін және көрінетін аймақ спектроскопиясының негіздері

Электрондық ауысулар теориясы ($\pi \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$, $\sigma \rightarrow \sigma^*$). Жарықтың жұтылу заңдары. Толқын ұзындығының хромофор табиғатымен байланысы. Бугер–Ламберт–Бер заңы. Хромофорлар мен ауксохромдар. Жұтылу спектрлері және заттардың концентрациясын есептеу. Органикалық қосылыстардың әртүрлі кластарының УК-спектрлері. Конъюгацияланған жүйелерді, ароматты қосылыстарды және бояғыштарды зерттеуде УК-спектроскопияны қолдану.

4-тақырып. Инфрақызыл (ИҚ) спектроскопия

Инфрақызыл спектроскопияның теориялық негіздері: тербелмелі деңгейлер, дипольдік моменттер, молекулалардың тербелістері. ИҚ-спектрлерді интерпретациялау: функционалдық топтарды сәйкестендіру. Диагностикалық жұтылу жолақтары және олардың маңызы. Сутектік байланыстарды, конформацияларды және полимерлерді зерттеуде ИҚ-спектроскопияны пайдалану.

5-тақырып. Протондық ЯМР-спектроскопия (^1H ЯМР)

Ядролық магниттік резонанс принциптері: спин, магнит өрісі, резонанс. Химиялық ығысу, спин-спиндік әрекеттесу тұрақтылары (J), сигналдардың интегралдық қарқындылығы. Қарапайым және күрделі ^1H ЯМР спектрлерін талдау. Алкандардың, арендердің және гетероциклді қосылыстардың спектрлерін интерпретациялау мысалдары.

6-тақырып. Көміртек ядроларының ЯМР-спектроскопиясы (^{13}C ЯМР) және көпөлшемді ЯМР-спектроскопия

Ядролық магниттік резонанс принциптері. Химиялық ығысулар, спин-спиндік әрекеттесу. ^{13}C ЯМР спектроскопиясының ерекшеліктері: төмен сезімталдық, спин-спиндік әрекеттесуді басу. DEPT, APT, INEPT әдістері. Екіөлшемді ЯМР-спектроскопия: COSY, HSQC, HMBC, NOESY – принциптері және интерпретациясы. Органикалық қосылыстардың құрылымын көпөлшемді ЯМР әдістері арқылы талдау.

7-тақырып. Масс-спектрометрия

Масс-спектрометрияның принциптері: иондану, иондарды үдету, массалық талдау. Иондану түрлері, фрагментация процестері, молекулалық иондар. Иондандыру әдістері: EI, CI, FAB, MALDI, ESI. Масс-спектрлерді интерпретациялау: молекулалық ион, фрагментация, изотоптық шыңдар. Құрылымды сәйкестендіру және молекулалық массаны анықтау үшін масс-спектрометрияны қолдану. Молекулалық формуланы растауда масс-спектрлерді пайдалану.

8-тақырып. Бөлу және талдаудың хроматографиялық әдістері

Хроматография принциптері: адсорбция, таралу, ион алмасу. Жұқа қабатты хроматография (ЖҚХ), газдық хроматография (ГХ), сұйықтық хроматографиясы (СХ), жоғары тиімді сұйықтық хроматографиясы (ЖТСХ): ерекшеліктері және қолданылу салалары. Бөлу шарттарын таңдау. Сапалық және сандық талдау. Қозғалмалы және қозғалмайтын фазаларды таңдау. Хроматограммаларды интерпретациялау.

9-тақырып. Хроматография–масс-спектрометрия (ГХ-МС, ЖХ-МС)

Талдаудың біріктірілген әдістері: артықшылықтары мен мүмкіндіктері. Аппараттық қамтамасыз ету және әдістерді біріктіру. Күрделі қоспаларды талдау мысалдары (синтез өнімдері, табиғи текті экстракттар). Бағдарламалық қамтамасыз ету және алынған деректерді интерпретациялау.

10-тақырып. Жақын инфрақызыл және көрінетін аймақ спектроскопиясы

Жақын инфрақызыл спектроскопия (NIR): принциптері және сапаны бақылауда қолданылуы. Колориметрия және спектрдің көрінетін аймағындағы спектроскопия: боялған қосылыстарды анықтау. Градуирлеу графиктері негізінде сандық талдау жүргізу.

11-тақырып. Поляриметрия және циркулярлық дихроизм

Поляриметрия негіздері: оптикалық белсенділікті өлшеу. Хиральді қосылыстардың конфигурациясын анықтау. Циркулярлық дихроизм (CD): әдістің принципі, хиральділікті талдау. Стереохимиялық зерттеулерде қолданылуы.

12-тақырып. Термогравиметриялық және дифференциалдық сканерлеуші талдау (ТГА, ДСК)

Термиялық талдау әдістері: принциптері және термограммаларды интерпретациялау. Қыздыру кезінде массаның өзгеруі. Заттардың ыдырау температуралары мен термиялық тұрақтылығы. Эндотермиялық және экзотермиялық процестер. Фазалық ауысуларды зерттеу және заттардың тазалығын анықтауда қолданылуы. Құрамын, тұрақтылығын, балқу температурасын және фазалық ауысуларын анықтау. Полимерлерді, материалдарды және координациялық қосылыстарды талдауда пайдалану.

13-тақырып. Кристаллохимиялық әдістер. Рентгенқұрылымдық талдау (РҚТ)

Рентгендік дифракцияның принциптері: кристалдар, кристалдық торлар, Миллер индекстері. Монте-Карло әдісі, элементар ұяшық параметрлері. Органикалық молекулалардың кеңістіктік құрылысын анықтау. Рентгенқұрылымдық талдау – қосылыс құрылымын растаудың «алтын стандарты».

14-тақырып. Электрохимиялық талдау әдістері

Вольтамперометрия, потенциометрия, кулонометрия. Органикалық заттардың электродтық процестері. Ароматты және иондық қосылыстарды талдауда электрохимиялық әдістерді қолдану. Ионселективті электродтармен (ИСЭ) және биосенсорлармен жұмыс істеу.

15-тақырып. Органикалық қосылыстарды зерттеудегі кешенді тәсіл

Кешенді сәйкестендіру стратегиялары: аналитикалық әдістерді қолдану реттілігі. Әдістерді сезімталдығы, селективтілігі және ақпараттылығы бойынша салыстыру. Практикалық мысалдар: синтез өнімдерін талдау, фармацевтикалық субстанциялардың сапасын бақылау, табиғи қосылыстарды зерттеу. Әдістерді валидациялау, нәтижелердің дәлдігі мен қайталанғыштығын бағалау.

«ЖІҢІШКЕ ОРГАНИКАЛЫҚ СИНТЕЗ ТЕХНОЛОГИЯСЫ» ПӘНІ

1-тақырып. Жіңішке органикалық синтезге кіріспе

Жіңішке органикалық синтездің анықтамасы мен міндеттері. Жіңішке органикалық синтездің ірі тоннажды және зертханалық синтезден айырмашылығы. Фармацевтикада, агрохимияда және материалтанудағы жіңішке органикалық синтездің рөлі. Өнімдердің тазалығына, шығымына және селективтілігіне қойылатын талаптар. Технологиялық үдерісті әзірлеу кезеңдері. Технологиялық жабдықтар: реакторлар, колонналар, кептіру қондырғылары. Сапаны бақылау, тиісті өндірістік тәжірибе (GMP), патенттік қорғау.

2-тақырып. Органикалық синтезді жоспарлау: ретросинтетикалық талдау

Синтезді жоспарлау әдістері: Физер, Кордебуа және Шихан әдістері. Ретросинтетикалық талдау және синтетикалық эквиваленттер. Байланыстарды ұзу қағидаттары және синтондық тәсіл. Синтез жолдарын таңдаудың стратегиялары. Молекуланың құрылымдық элементтері (негізгі байланыстар). Синтез бағыттарын кезеңдер саны, өнім шығымы және реагенттердің қолжетімділігі бойынша бағалау. Белсенді фармацевтикалық ингредиенттердің (БФИ) синтезі мысалдарын талдау.

3-тақырып. Органикалық молекулаларды белсендірудің заманауи әдістері

Электрофильдік және нуклеофильдік белсендіру. C–H байланыстарын белсендіру. Катализ түрлері: қышқыл-негіздік, металлорганикалық және ферментативтік катализ. Белсендіруші реагенттерді пайдалану (DCC, CDI, EDC, MsCl және т.б.).

4-тақырып. Функционалдық топтарды енгізу әдістері

Алکیلдеу, ацилдеу, сульфирлеу, нитрлеу. Металлорганикалық қосылыстар қатысатын реакциялар (Гриньяр реагенттері, литийорганикалық және мысорганикалық қосылыстар). Реакцияларды жүргізу үшін реагенттер мен жағдайларды таңдау: еріткіш, температура және уақыт. Хемоселективтілікті бақылау.

5-тақырып. Органикалық синтездегі қорғаныш топтар

Қорғаныш топтарды қолдану қажеттілігі. Спирттер, аминдер және карбон қышқылдары үшін қорғаныш топтардың түрлері. Қорғаныш топтарды енгізу және жою шарттары (BOC,

Fmoc, TBDMS, Ac, Tr). Қорғау және қорғауды жою сатыларын қамтитын көпсатылы синтездердің мысалдары.

6-тақырып. Ароматты қосылыстар: модификациялау және функционалдандыру

Электрофильдік және нуклеофильдік орынбасу реакциялары. Диазоқосылыстар және Зандмейер реакциялары. Ароматты сақиналарды металдау әдістері (Li, Mg, Pd). Кросс-түйістіру реакциялары: Сузуки, Хек, Соногашира және Бухвальд–Хартвиг реакциялары.

7-тақырып. Асимметриялық синтез және хиральді катализаторлар

Стереохимия: энантиоселективтілік және диастереоселективтілік. Хиральді көмекші заттар мен лигандтар. Хиральділікті индукциялау әдістері. α -Аминоспирттер мен хиральді эпоксидтердің синтезі мысалдары. Асимметриялық синтезді өнеркәсіпте қолдану мысалдары.

8-тақырып. Тотығу және тотықсыздану реакциялары

Классикалық және заманауи реагенттер: PCC, DMP, Сверн реакциясы, LiAlH_4 , NaBH_4 , H_2/Pd . Функционалдық топтардың тұрақтылығы. Каталитикалық және селективті тотықсыздандыру. Электрохимиялық және фотохимиялық тотығу. Күшті тотықтырғыштармен және тотықсыздандырғыштармен жұмыс істеудегі қауіпсіздік талаптары.

9-тақырып. Көпсатылы синтез: ұйымдастыру, оңтайландыру және масштабтау

Көпсатылы синтездерді құру қағидаттары. Өнім шығымының теңгерімі және аралық өнімдерді тазарту. Синтез сатыларын оңтайландыру: реагенттерді және реакция шарттарын таңдау. Зертханалық деңгейден тәжірибелік-өнеркәсіптік өндіріске дейінгі үдерісті масштабтау.

10-тақырып. Органикалық синтездегі катализ

Гомогенді және гетерогенді катализ. Каталитикалық циклдердің механизмдері. Палладий, мыс, родий және рутенийдің C–C және C–N байланыстарын түзу реакцияларындағы катализатор ретіндегі рөлі. Өнеркәсіптік органикалық синтездегі қолданылу мысалдары. Еріткіштің, температураның және катализатордың әсері. Реакцияларды «жұмсақ» және «қатаң» жағдайларда жүргізу мысалдары.

11-тақырып. Жасыл синтез: тұрақты органикалық синтез қағидаттары

Жасыл химияның он екі қағидаты. Еріткіштерсіз синтез әдістері (қатты фазалық және механохимиялық үдерістер). Уытты еріткіштерді экологиялық қауіпсіз баламалармен алмастыру. Тұрақты синтетикалық бағыттардың мысалдары. Атомдық үнемділік және қалдықсыз технологиялар. Биокатализ.

12-тақырып. Микротолқынды, ультрадыбыстық және фотохимиялық синтез

Энергияны үнемдейтін және жеделдетілген синтез әдістері. Артықшылықтары: жоғары жылдамдық, өнім шығымының және тазалығының артуы. Қолданылатын жабдықтар, қауіпсіздік талаптары және әдістердің шектеулері. Циклогексен мен ароматты аминқышқылдарының синтезі мысалдары.

13-тақырып. Жіңішке органикалық синтез өнімдерін тазарту және бөлу әдістері

Экстракция, қайта кристалдандыру, дистилляция. Хроматографиялық әдістер: колонкалық хроматография, жоғары тиімді сұйықтық хроматографиясы (ЖТСХ), жұқа қабатты хроматография (ЖҚХ). Изомерлер қоспаларын бөлу. Жоғары сезімтал қосылыстарды тазарту.

14-тақырып. Тазалықты талдау және құрылымды растау

Талдау әдістері: ЯМР-, ИҚ-, УК-спектроскопия, масс-спектрометрия, элементтік талдау. Деректерді интерпретациялау және қосылыстардың құрылымын анықтау. Поляриметрия және хиральді хроматография әдістерімен оптикалық тазалықты бағалау. Біріктірілген талдау әдістерін пайдалану (ЖХ-МС, екіөлшемді ЯМР-спектроскопия).

15-тақырып. Жіңішке органикалық синтездің өнеркәсіптік үдерістері

Рецептуралар мен технологиялық үдерістерді әзірлеу. Өндірісті масштабтау мәселелері. Үдерістердің тәуекелдерін, энергия сыйымдылығын және қауіпсіздігін бағалау. Фармацевтикалық субстанцияларды, хош иістендіргіштер мен бояғыштарды алудың типтік технологиялық сызбалары.

«ҒЫЛЫМИ ЗЕРТТЕУЛЕРДІ ҰЙЫМДАСТЫРУ ЖӘНЕ ЖОСПАРЛАУ» ПӘНІ

1-тақырып. Ғылым және ғылыми зерттеу

Ғылымның танымның ерекше түрі ретіндегі ұғымы. Ғылыми білімнің күнделікті білімнен айырмашылығы. Ғылыми танымның құрылымы: субъект, объект, мақсат, зерттеу әдістері. Техника мен қоғамның дамуындағы ғылымның рөлі. Мамандарды даярлау жүйесіндегі ғылымның орны. Ғылыми зерттеулердің түрлері: іргелі, қолданбалы және ізденістік зерттеулер. Ғылыми қызметтің мақсаттары мен міндеттері.

2-тақырып. Ғылыми зерттеулердің жіктелуі және құрылымы

Ғылыми зерттеулерді сипатына қарай жіктеу: теориялық және эксперименттік зерттеулер. Орындау кезеңдері бойынша жіктеу: алдын ала, негізгі және қорытынды зерттеулер. Ғылыми зерттеудің құрылымы: гипотеза, мақсат, міндеттер, әдістер, нәтижелер. Зерттеу бағдарламасы мен ғылыми жоба ұғымдары.

3-тақырып. Ғылыми зерттеуді ұйымдастыру кезеңдері

Зерттеудің дайындық, эксперименттік, аналитикалық және қорытынды кезеңдері. Зерттеу бағдарламасын әзірлеу. Жұмыстың өзектілігі мен практикалық маңыздылығын негіздеу. Ғылыми зерттеудің негізгі кезеңдері: мәселені қою, гипотезаны тұжырымдау, зерттеу әдістерін таңдау. Зерттеуді жоспарлау және жобалау. Зертханалық және өндірістік базаны ұйымдастыру. Зерттеу кезеңдерінің орындалуын және мерзімдердің сақталуын бақылау.

4-тақырып. Ғылыми зерттеудің мәселесі мен тақырыбы

Ғылыми мәселе ұғымы. Ғылыми мәселені таңдаудың критерийлері. Зерттеу тақырыбын тұжырымдау. Зерттеудің өзектілігі мен ғылыми жаңалығы. Гипотезаны тұжырымдауға қойылатын талаптар. Зерттеудің мақсаты мен міндеттерін қою. Зерттеу объектісі мен пәні.

Ғылыми жаңалықтың критерийлері. Гипотезаны тұжырымдау мен зерттеу әдістерін таңдаудың өзара байланысы.

5-тақырып. Әдеби және патенттік дереккөздерді талдау

Ғылыми ақпаратты іздеу стратегиялары. Ғылыми деректер базаларын пайдалану: eLIBRARY, Web of Science, Scopus, Google Scholar. Кітапхана ресурстары мен дәйексөз индексін пайдалану. Ғылыми дереккөздерді сыни талдау әдістері. Ақпаратты іздеу, жүйелеу және өңдеу. Библиографиялық шолу дайындау. Заманауи ғылыми үрдістер мен патенттік ақпаратты талдау.

6-тақырып. Ғылыми зерттеулердің әдіснамасы мен әдістері

Ғылыми зерттеулердің жіктелуі. Ғылыми жұмыстың кезеңдері: мақсат қоюдан бастап нәтижелерді енгізуге дейін. Ғылыми әдіснама ұғымы. Жалпы ғылыми және арнайы зерттеу әдістері. Теориялық зерттеу әдістері: дедукция, индукция, талдау, синтез, формализация. Химиялық-технологиялық зерттеулердегі әдіснамалық тәсілдер. Эксперименттік зерттеу әдістері. Математикалық модельдеу. Деректерді статистикалық өңдеу және талдау әдістері.

7-тақырып. Ғылыми қызметті жоспарлау

Жоспарлаудың түрлері: перспективалық, қысқа мерзімді және жедел жоспарлау. Эксперименттің мақсаты мен міндеттерін қою. Зерттеу объектісін, факторларын және эксперимент жүргізу шарттарын таңдау. Зерттеу сызбасын әзірлеу. Жұмыс жоспарын құру. Ресурстар мен уақытты бөлу. Зерттеу тобын ұйымдастыру. Ғылыми жобаны басқару. Нәтижелердің сенімділігі мен қайталанғыштығын анықтау тәсілдері.

8-тақырып. Зерттеу ұсынысын (Research Proposal) дайындау

Зерттеу ұсынысының құрылымы мен негізгі элементтері. Зерттеудің мақсаты мен міндеттерін тұжырымдау. Өзектілігі мен ғылыми жаңалығын негіздеу. Зерттеудің күнтізбелік жоспары мен бюджетін құру. Грант берушілердің ғылыми жобаларға қоятын талаптары.

9-тақырып. Ғылыми зерттеулерді қаржыландыру

Қаржыландыру көздері: мемлекеттік, халықаралық және жеке. Гранттық бағдарламалар мен конкурстар. Гранттық өтінімді дайындау және қорғау. Ғылыми жобаның бюджеті: шығын баптары және шығындарды негіздеу.

10-тақырып. Ғылыми нәтижелердің сенімділігі, валидтілігі және қайталанғыштығы

Ғылыми деректердің сенімділігі ұғымы. Қателердің түрлері: кездейсоқ, жүйелік және логикалық. Зерттеулердің дәлдігін арттыру әдістері. Нәтижелердің қайталанғыштығы және эксперименттердің қайта жүргізілу мүмкіндігі.

11-тақырып. Ғылыми зерттеу нәтижелерін рәсімдеу

Ғылыми есепті дайындау. Ғылыми жарияланымдардың түрлері. Ғылыми мақала: құрылымы, рәсімделуі және журналға ұсыну тәртібі. Диссертация: құрылымы және мемлекеттік стандарттар талаптары. Дәйексөз келтіру және библиографиялық сілтемелерді рәсімдеу ережелері. Плагиат және антиплагиат жүйелері. Тезистер, ауызша және постерлік

баяндамалар, презентациялар дайындау. Деректерді визуализациялау және ұсыну. Ақпаратты ұсынудың графикалық және кестелік әдістері: диаграммалар, сызбалар, графиктер. Визуализацияның бағдарламалық құралдарын пайдалану. Ақпаратты ұсынудың картографиялық және когнитивтік тәсілдері.

12-тақырып. Жарияланымдық қызмет

Ғылыми журналды таңдау (соның ішінде Scopus, Web of Science деректер базаларында индекстелетін және ҚР ҒЖБМ Ғылым және жоғары білім сапасын қамтамасыз ету комитеті ұсынған журналдар). Мақаланы ұсыну және рецензиялау үдерісі. Редакторлармен және рецензенттермен өзара әрекеттесу. Ғылымиметриялық көрсеткіштер мен дәйексөз индекстері (Хирш индексі, РИНЦ және т.б.). ORCID, ResearchGate және Publons ғылыми профильдерін пайдалану. Ғылыми жарияланымдардың авторлық құқығы және лицензиялануы.

13-тақырып. Инновациялық қызмет және ғылымды коммерцияландыру

Ғылыми идеядан технологияға дейінгі жол. Зияткерлік меншік және патенттеу. Ғылыми жобаның бизнес-жоспарын әзірлеу. Технологияларды трансферттеу. Стартаптар мен инновациялық кәсіпорындарды құрудың негізі ретіндегі ғылым.

14-тақырып. Халықаралық ғылыми ынтымақтастық

Халықаралық ғылыми бағдарламалар мен қорлар. Бірлескен жарияланымдар мен ғылыми жобалар. Академиялық ұтқырлық және шетелдік тағылымдамалар. Халықаралық ғылыми хат алмасудың этикасы мен ережелері. Ағылшын тілі – халықаралық ғылыми коммуникация тілі.

15-тақырып. Ғылыми зерттеулер этикасы мен мәдениеті

Академиялық адалдық қағидаттары. Авторлық құқық, дәйексөз келтіру және плагиаттың алдын алу. Зерттеулерді, әсіресе тірі зерттеу нысандары қатысатын эксперименттерді жүргізу этикасы. Зерттеушінің ғылыми адалдығы мен жауапкершілігі. Мүдделер қақтығысы. Этикалық комитеттер және биоэтика. Ғылыми бұзушылықтардың мысалдары және олардың салдары (деректерді бұрмалау, қолдан жасау және ғылыми алаяқтықтың басқа түрлері).