

Министерство науки и высшего образования
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
элемента ООП подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
ТЕОРИЯ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЩЕСТВА В ХИМИИ

Направление подготовки

04.06.01 Химические науки

Направленность

Органическая химия

Квалификация:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения:

Очная

Раздел ООП:

Блок 1. Дисциплины (модули). Вариативная часть

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
элемента ООП подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
ТЕОРИЯ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕЩЕСТВА В ХИМИИ

Направление подготовки

04.06.01 Химические науки

Направленность

Органическая химия

Квалификация:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения:

Очная

Раздел ООП:

Блок 1. Дисциплины (модули). Вариативная часть

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им.И.Я. Пастовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

ОДОБРЕНО

Ученым советом
ИОС УрО РАН
«22» апреля 2015 г.
Протокол № 6

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИОС УрО РАН
академик РАН _____ В.Н. Чарушин
«22» апреля 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Теория методов исследования вещества в химии

Шифр и название направления подготовки **04.06.01 Химические науки**

Направленность **02.00.03 Органическая химия**

Квалификация: **«Исследователь. Преподаватель-исследователь»**

Форма обучения: **Очная (Заочная)**

Статус дисциплины:

Блок Б 1. «Дисциплины (модули)». Вариативная часть

Екатеринбург – 2015

Программа дисциплины составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта к основной образовательной программе высшего образования – программе подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 04.06.01 Химические науки, утвержденного приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 № 869, с учетом приказа Минобрнауки России от 30.04.2015 № 464 «О внесении изменений в федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования (уровень кадров высшей квалификации)».

Автор-разработчик:

Пестов А.В., к.х.н., доцент, старший научный сотрудник ИОС УрО РАН

АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ

Программа предназначена для аспирантов, обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом.

Дисциплина «Теория методов исследования вещества в химии» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» основной образовательной программы (*далее – ООП*) аспирантуры и является обязательной для освоения.

Рабочая программа соответствует:

- паспорту научной специальности 02.00.03 (направленность Органическая химия);
- учебному плану ООП аспирантской подготовки.

Освоение дисциплины осуществляется на первом курсе (1 семестр) обучения в соответствии с графиком учебного процесса.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е. (108 час.), в том числе:

- аудиторная работа - 2,0 з.е. (72 ч), представлена лекционными (18 ч/0.5 з.е.) , практическими (18 ч/0.5 з.е.) и лабораторными (36 ч/1.0 з.е.) занятиями;
- самостоятельная деятельность аспиранта - 1,0 з.е. (36 ч).

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов системы углубленных знаний о современных методах спектрального анализа и квантово-химических расчетов при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований.

Задачи дисциплины – обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний и практических навыков для анализа спектральных данных и проведения квантово-химических расчетов, умения использовать их результаты для понимания строения и свойств молекул.

Систематизирование материала по дисциплине происходит в рамках девяти разделов:

- Основные постулаты квантовой механики;
- Квантово-химические расчеты;
- Электронное строение атома;
- Электронное строение молекул;
- Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом;
- Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени;
- Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени;
- ИК-спектроскопия;
- Спектроскопия ЯМР.

Виды контроля:

- текущий – зачет (1 семестр);
- итоговый – в рамках государственного экзамена (8 семестр).

1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель изучения дисциплины - формирование у аспирантов системы углубленных знаний о современных методах спектрального анализа и квантово-химических расчетов при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований.

Задачи дисциплины – обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний и практических навыков для анализа спектральных данных и проведения квантово-химических расчетов, умения использовать их результаты для понимания строения и свойств молекул.

2 ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ЗАВЕРШИВШЕГО ИЗУЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1 Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

- способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по специальности (направленности) 02.00.03 Органическая химия (ПК-1).

2.2. Требования к результатам освоения дисциплины:

В результате освоения дисциплины аспирант должен

знать:

- методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач

- современные способы использования информационно-коммуникационных технологий (ИКТ) в выбранной сфере деятельности

- современное состояние науки в области органической химии;

уметь:

- анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов

- выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования;

владеть:

- навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач

- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов

- методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (специальности) подготовки.

2.3 Связь с последующими элементами ООП методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении дисциплины «Теория методов исследования вещества в химии», необходимы для выполнения аспирантами элементов ООП Блока 3 «Научные исследования»: научно-исследовательская деятельность и подготовка научно-квалификационной работы.

3 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1 ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ И КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.		
	Всего	По учебным семестрам	
		1	7
Аудиторные занятия:	72/2.0	72/2.0	
Лекции	18/0.5	18/0.5	
Практические занятия	18/0.5	18/0.5	
Лабораторные занятия	36/1.0	36/1.0	
Самостоятельная работа студентов - Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	36/1.0	36/1.0	
Вид контроля:	-	-	
текущий	-	Зачет	
промежуточный	-	-	
итоговый	-	-	ГИЭ
Общая трудоемкость по учебному плану	108/3.0	108/3.0	

2.2 РАЗДЕЛЫ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц				
		Всего	лекции	практические занятия	лабораторные работы	Самостоятельная работа
1	Основные постулаты квантовой механики	5/0.139	4/0.111	0	0	1/0.028
2	Квантово-химические расчеты	37/1.028	3/0.083	6/0.167	14/0.385	14/0.385
3	Электронное строение атома	2/0.056	1/0.028	0	0	1/0.028
4	Электронное строение молекул	2/0.056	1/0.028	0	0	1/0.028

5	Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом	2/0.056	1/0.028	0	0	1/0.028
6	Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени	14/0.389	2/0.056	2/0.056	6/0.165	4/0.111
7	Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени	14/0,389	2/0.056	4/0.111	4/0.111	4/0.111
8	ИК-спектроскопия	16/0.444	4/0.111	2/0.056	6/0.167	4/0.111
9	Спектроскопия ЯМР	18/0,5	2/0.056	4/0.111	6/0.167	6/0.167
	<i>Итого:</i>	108/3.0	18/0,5	18/0,5	36/1.0	36/1.0

2.3 ЛЕКЦИОННЫЙ КУРС

Тема 1. Основные постулаты квантовой механики.

Волновая функция и уравнение Шредингера. Природа электрона. Операторы физических величин: координаты x, y, z ; функция от пространственных координат; проекция импульса на ось; вектор импульса; функция от вектора импульса; кинетическая энергия; момент импульса; квадрат момента импульса; потенциальная энергия; гамильтониан частицы и системы частиц; спин электрона; полный момент импульса электрона и спин-орбитальное взаимодействие. Принцип неопределенности Гейзенберга. Разделение пространственной и спиновой составляющей волновой функции. Уравнение Шредингера в матричной форме. Стационарные состояния

Тема 2. Квантово-химические расчеты.

Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Разделение электронного и ядерного движения. Молекулярная механика. Полуэмпирические методы. Метод Хартри-Фока. Метод функционала электронной плотности (DFT). Базисные наборы.

Расчет геометрии молекул, их электронного строения и энергии методом DFT.

Тема 3. Электронное строение атома.

Электронное строение атома. Квантовые числа: главное, орбитальное, магнитное, спиновое. Атомные орбитали. Заполнение атомных орбиталей электронами.

Тема 4. Электронное строение молекул.

Электронное строение двухатомных молекул (водорода, азота). Молекулярные орбитали. Теория ЛКАО. Связывающие, антисвязывающие, несвязывающие молекулярные орбитали. δ , π -орбитали. Гетероатомные полиатомные молекулы. Гибридизация и теория (метод)

Тема 5. Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом.

Электромагнитное излучение. Квантованность. Фотон. Энергия фотона. Спектр электромагнитного излучения и энергетические переходы вещества, связанные с его поглощением. Типы спектроскопии

Тема 6. Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени.

Возбужденные состояния, спиновая мультиплетность, диаграммы состояний. Спектры поглощения. Факторы, влияющие на интенсивность спектров поглощения: приближение Борна-Оппенгеймера; правила отбора; принцип Франка-Кондона; спин и спин-орбитальное взаимодействие; электронный момент перехода и поляризация;

вибронное взаимодействие и запрещенные переходы; перекрывание орбиталей. Типы переходов. Свойства возбужденных состояний: геометрия; полярность, энергия, влияние растворителя. Расчет электронных спектров поглощения методом функционала электронной плотности, разрешенным во времени (TDDFT). Практические аспекты. Визуализация.

Тема 7. Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени.

Полная диаграмма Яблонского. Излучательные переходы: флюоресценция, фосфоресценция, замедленная флюоресценция. Безизлучательные переходы: внутренняя конверсия, интеркомбинационная конверсия. Спектры люминесценции. Стоксов сдвиг. Квантовый выход. Закон энергетической щели. Расчет электронных спектров испускания методом TDDFT.

Тема 8. ИК-спектроскопия.

Колебательные переходы. Модель двухатомной молекулы как гармонического осциллятора. Закон Гука. Правила отбора для ИК-спектроскопии. Типы колебаний: валентные и деформационные. Симметричные и асимметричные колебания. Взаимодействие колебаний. Резонанс Ферми.

Расчет ИК-спектров методом DFT. Визуализация

Тема 9. Спектроскопия ЯМР.

Спин и магнитный момент ядра и его взаимодействие с внешним магнитным полем. Энергия ядер в магнитном поле. Экранирование ядер электронами. Химический сдвиг. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность. Связь константы ССВ с геометрией молекулы. Расчет химических сдвигов ядер квантово-химическими методами.

2.4 ПРАКТИЧЕСКИЕ (СЕМИНАРСКИЕ) ЗАНЯТИЯ

Раздел, тема дисциплины	Тема занятия	Объем учебного времени, час./ зачетные единицы
Квантово-химические расчеты	Метод DFT. Функционалы и базисы	4 / 0.11
Квантово-химические расчеты	Анализ молекулярных орбиталей	2 / 0.055
Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени	Электронные переходы. Диаграмма Яблонского	2 / 0.055
Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени	Излучательные и безизлучательные переходы	2 / 0.055
ИК-спектроскопия	Типы и энергия колебаний	2 / 0.055
Спектроскопия ЯМР	Химический сдвиг	4/ 0.11
Спектроскопия ЯМР	Спин-спиновое взаимодействие	2 / 0.06
		18 / 0.5

2.5. ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

Раздел, тема дисциплины	Наименование работы	Объем учебного времени, час. / зачетные единицы
Квантово-химические	Расчет геометрии и	4 / 0.11

расчеты	энергии органических молекул	
Квантово-химические расчеты	Визуализация и анализ молекулярных орбиталей	4 / 0.11
Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени	Расчет электронных спектров поглощения	8 / 0.22
Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени	Расчет электронных спектров испускания.	4 / 0.11
ИК-спектроскопия	Расчет ИК-спектров	4 / 0.11
Спектроскопия ЯМР	Расчет ЯМР-спектров	8 / 0.22
Спектроскопия ЯМР	Расчет геометрии и энергии органических молекул	4 / 0.12
		36 / 1,0

3 ОРГАНИЗАЦИЯ ТЕКУЩЕГО И ПРОМЕЖУТОЧНОГО КОНТРОЛЯ ЗНАНИЙ

3.1 КОНТРОЛЬНЫЕ РАБОТЫ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

3.2 СПИСОК ВОПРОСОВ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОГО ТЕСТИРОВАНИЯ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

3.3 САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Изучение учебного материала, перенесенного с аудиторных занятий на самостоятельную проработку.

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по следующим направлениям:

- библиография по проблемам строения и реакционной способности органических соединений;
- публикации (в том числе электронные) источников по проблемам строения и реакционной способности органических соединений;
- научно-исследовательская литература по актуальным проблемам строения и реакционной способности органических соединений;

Конспектирование и реферирование первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим блокам.

3.3.1 ПОДДЕРЖКА САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Электронные образовательные ресурсы

Механизмы органических реакций. www.chemtube3d.com

Периодическая таблица элементов. www.ptable.com

Интерактивное приложение к учебнику Keeler J., Wothers P. Chemical structure and reactivity. www.oup.com/uk/orc/bin/9780199289301/01student/weblinks/

Программное обеспечение

Пакет программ для квантово-химических расчетов Orca 2.8.0

Визуализатор пространственной структуры и молекулярных орбиталей Chemcraft

1.6

Редактор химических формул. ISIS/Draw 2.5

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Химическая энциклопедия (*сайт www.ximuk.ru*)

<http://ru.wikipedia.org> – Именные реакции в органической химии

<http://en.wikibooks.org>

<http://www.alhimikov.net> – Электронный учебник по органической химии

<http://www.chemistry.ssu.samara.ru/chem4/link211.htm>

<http://stavrop.fcior.edu.ru/card/1339/laboratornaya-rabota-konstruirovanie-mehanizmov-himicheskikh-reakciy-po-teme-kislородosoderzhashie-or.html> - Федеральный центр образовательных ресурсов

<http://nehudlit.ru/books>.

3.3.2 ТЕМАТИКА РЕФЕРАТОВ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ - проводится в виде экзамена кандидатского минимума.

4 ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ И КОНТРОЛЯ, ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭВМ (*Перечень обучающих, контролирующих и расчетных программ, диафильмов, слайдфильмов, кино- и телефильмов*).

Программы пакета Microsoft Office;

Пакет программ для квантово-химических расчетов Orca 2.8.0;

Визуализатор пространственной структуры и молекулярных орбиталей Chemcraft;

Информационные сервисы: Sciencedirect, Elibrary, Chemtube3D.

Электронные ресурсы Центральной научной библиотеки (ЦНБ) УрО РАН (30 точек доступа) - <http://cnb.uran.ru/>

5 АКТИВНЫЕ МЕТОДЫ ОБУЧЕНИЯ (ДЕЛОВЫЕ ИГРЫ, НАУЧНЫЕ ПРОЕКТЫ) - НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

6 МАТЕРИАЛЬНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (*Современные приборы, установки (стенды), необходимость специализированных лабораторий и классов*)

Институт располагает современным приборным парком для анализа состава и изучения структуры и свойств органических соединений, включая:

- ЯМР, хроматомасс-спектрометрию, ИК-, КР и УФ- спектроскопию;
- высокоэффективную жидкостную и газо-жидкостную хроматографию;
- рентгеноструктурный анализ;
- поляриметрию;
- автоматического СНИ анализа;
- проведения реакций при высоком давлении

и др.

Центр коллективного пользования «Спектроскопия и анализ органических соединений» института (ЦКП САОС)), имеет Аттестат признания компетентности испытательной лаборатории (центра) № 0011, рег. № РОСС RU.В503.04НЖ00.66.04.0009.

Группа элементного анализа ИОС УрО РАН признана компетентной в целях выполнения работ по сертификационным испытаниям в Системе добровольной сертификации нанопродукции. С 2009 г. группа входит в состав Испытательного центра веществ, материалов и продукции наноиндустрии в УрФО.

В институте:

- создана локальная сеть, объединяющая 100 компьютеров, с выходом в Интернет;
- внедрена система корпоративной электронной почты на основе MS Exchange 2003, с возможностью удаленного доступа;
- предоставлены для пользования принтеры, сканеры и ксероксы.

7 ЛИТЕРАТУРА

7.1 РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Хаускрофт К., Констэбл Э. Современный курс общей химии. Т1. М.: Мир, 2002, 540 с.
2. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.- Бином. Лаборатория знаний. 2010. 496 с.
- 3 Драго, Р. С. Физические методы в химии : в 2 т. / Под ред. О. А. Реутова; Пер. с англ. А. А. Соловьянова. - М. : Мир, 1981 - . Т. 1. - 422 с.; Т. 2. - 456 с.
4. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. для ун-тов / Н. Ф. Степанов. - М. : Мир: Московский государственный университет, 2001. - 519 с.

7.2. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.
2. Пентин, Ю. А. Физические методы исследования в химии : учеб. для вузов по спец. "Химия" / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков. - М. : Мир: АСТ, 2003. - 683 с.
3. Сергеев Н. М. ЯМР-спектроскопия : учеб. пособие для химиков-органиков / Н. М. Сергеев. - [М.] : Изд-во Моск. ун-та, 1981. - 278 с.
4. Герсон, Ф. Спектроскопия ЭПР высокого разрешения : переводное издание / Ф. Герсон ; под ред. А. Л. Бучаченко ; пер. с англ. Ю. Б. Гребенщикова. - М. : Мир, 1973. - 214 с.

7.3 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Не предусмотрена

