

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

**18.06.01 Химическая технология**

Направленность

**Технология органических веществ**

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:

**18.06.01 Химическая технология**

Направленность:

**Технология органических веществ**

Квалификация:

**Исследователь. Преподаватель-исследователь**

Форма обучения:

**Очная**

Раздел ООП:

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

Программа дисциплины составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта к основной образовательной программе высшего образования – программе подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 18.06.01 Химическая технология, утвержденного приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 № 883, 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 05.17.04 (направленность Технология органических веществ),

- 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 (7 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);
- владение культурой научного исследования в области химической технологии, в том числе с использованием новых информационно-коммуникационных технологий (ОПК-2);
- способность и готовность к использованию лабораторной и инструментальной базы для получения научных данных (ОПК-5);
- способность к организации и самостоятельному проведению научно-исследовательской работы с получением научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям в избранной области (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
- правила эксплуатации лабораторного и инструментального оборудования и технику безопасности при использовании его в работе
- современное состояние науки в области технологии органических веществ;

*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
- использовать техническую документацию при освоении методов исследования, соблюдать технику безопасности при проведении исследований;

*владеть:*

- навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач
- навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач
- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов

- навыками использования лабораторного и инструментального оборудования по теме исследования
- методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (специальности) подготовки.

### 2.3 Связь с последующими элементами ООП

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
<b>Аудиторные занятия:</b>	<b>72/2.0</b>	<b>72/2.0</b>	
Лекции	18/0.5	18/0.5	
Практические занятия	18/0.5	18/0.5	
Лабораторные занятия	36/1.0	36/1.0	
<b>Самостоятельная работа студентов - Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку</b>	<b>36/1.0</b>	<b>36/1.0</b>	
<b>Вид контроля:</b>	-	-	
текущий	-	<b>Зачет</b>	
промежуточный	-	-	
итоговый	-	-	<b>ГИЭ</b>
<b>Общая трудоемкость по учебному плану</b>	<b>108/3.0</b>	<b>108/3.0</b>	

### 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	14/0.389	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.  $\delta$ ,  $\pi$ -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**

<b>Раздел, тема дисциплины</b>	<b>Тема занятия</b>	<b>Объем учебного времени, час./ зачетные единицы</b>
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
		<b>18 / 0.5</b>

## 2.5. ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

Раздел, тема дисциплины	Наименование работы	Объем учебного времени, час. / зачетные единицы
Квантово-химические расчеты	Расчет геометрии и энергии органических молекул	4 / 0.11
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
		<b>36 / 1,0</b>

### 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](http://www.chemtube3d.com)

Периодическая таблица элементов. [www.ptable.com](http://www.ptable.com)

Интерактивное приложение к учебнику Keeler J., Wothers P. Chemical structure and reactivity. [www.oup.com/uk/orc/bin/9780199289301/01student/weblinks/](http://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.xumuk.ru](http://www.xumuk.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-kislorodosoderzhashie-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 СNH 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



