

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.  
Приказ №         

**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

**Автор:**

Старший научный сотрудник ИОС УрО РАН,  
к.х.н., доцент

А.В. Пестов

**Екатеринбург – 2015**

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 02.00.03 – Органическая химия, в соответствии с Программой-минимумом кандидатского экзамена по специальности 02.00.03 «Органическая химия», утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ № 274 от 08.10.2007 г., и учебным планом ИОС УрО РАН по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

## **1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ, ЕЕ МЕСТО В СИСТЕМЕ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ОСВОЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **1.1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Цель изучения дисциплины** – формирование у аспирантов умения использовать современные методы спектрального анализа при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований.

**Задача дисциплины** – сформировать у аспирантов представление о физических основах спектральных методов исследования вещества, а также методах и подходах для анализа спектральных данных.

### **1.2 ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ЗАВЕРШИВШЕГО ИЗУЧЕНИЕ ДАННОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

**знать:**

- основы спектральных методов исследования вещества;
- основы квантовой механики;
- основные квантово-химические принципы и понятия;
- электронное строение атома и молекулы
- влияние структуры органического материала на его спектральные свойства;

**уметь:**

- описывать спектральные данные
- связывать строение вещества и спектральные характеристики
- находить и корректно использовать химическую и физико-химическую информацию
- переводить физико-химическую информацию на современный профессиональный язык;

**владеть:**

- опытом поиска и анализа информации
- опытом работы с базами данных
- опытом обсуждения, полученных результатов.

### **1.3 СВЯЗЬ С ПРЕДШЕСТВУЮЩИМИ ДИСЦИПЛИНАМИ**

Курс предполагает наличие у аспирантов знаний по органической химии в объеме программы высшего профессионального образования.

### **1.4 СВЯЗЬ С ПОСЛЕДУЮЩИМИ ДИСЦИПЛИНАМИ**

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данного курса, необходимы при подготовке и написании диссертации по специальности 02.00.03 – Органическая химия.

## **2 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **2.1 ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ (В ЧАСАХ И ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦАХ)**

Форма обучения (вид отчетности) - 2-3 годы аспирантуры; вид отчетности – экзамен кандидатского минимума.

<b>Вид учебной работы</b>	<b>Объем часов / зачетных единиц</b>
<b>Трудоемкость изучения дисциплины</b>	108 / 3
<b>Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)</b>	72 / 2
в том числе:	
лекции	18 / .0.5
практические занятия	18 / .0.5
лабораторные работы	36 / 1
<b>Самостоятельная работа аспиранта (всего)</b>	36 / 1
в том числе:	
Подготовка к практическим занятиям	0
Подготовка реферата	0
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	36 / 1

## 2.2 РАЗДЕЛЫ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ ЗАНЯТИЙ

<b>№ п/п</b>	<b>Название раздела дисциплины</b>	<b>Объем часов / зачетных единиц</b>			
		<b>лекции</b>	<b>практические занятия</b>	<b>лабораторные работы</b>	<b>Самостоятельная работа</b>
1	Основные постулаты квантовой механики	2 / 0.06	0	0	4 / 0.12
2	Результаты частных решений уравнения Шредингера	2 / 0.06	0	0	4 / 0.12
3	Электронное строение атома	2 / 0.06	0	0	4 / 0.12
4	Электронное строение молекул	2 / 0.06	2 / 0.06	0	4 / 0.12
5	Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом	2 / 0.06	0	0	4 / 0.12
6	ИК- и КР-спектроскопия	2 / 0.06	4 / 0.12	9 / 0.25	4 / 0.12
7	УФ-спектроскопия	2 / 0.06	4 / 0.12	9 / 0.25	4 / 0.12

8	Спектроскопия ЯМР	2 / 0.06	4 / 0.12	9 / 0.25	4 / 0.12
9	Спектроскопии для изучения твердого тела	2 / 0.06	4 / 0.12	9 / 0.25	4 / 0.12
<i>Итого:</i>		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. Результаты частных решений уравнения Шредингера.**

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. ИК- и КР-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.

### **Тема 7. УФ-спектроскопия.**

Электронные переходы между молекулярными орбиталями. Теория кристаллического поля.

### **Тема 8. 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.

### **Тема 9. Спектроскопии для изучения твердого тела.**

Рентгено-фазовый анализ. Рентгено-структурный анализ. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Сканирующая и просвечивающая электронная микроскопия.

#### **2.4 ПРАКТИЧЕСКИЕ (СЕМИНАРСКИЕ) ЗАНЯТИЯ**

<b>Раздел, тема дисциплины</b>	<b>Тема занятия</b>	<b>Объем учебного времени, час./ зачетные единицы</b>
<b>4. Электронное строение молекул.</b>	Анализ молекулярных орбиталей	2 / 0.06
<b>6. ИК- и КР-спектроскопия.</b>	Анализ ИК- и КР-спектров	4 / 0.12
<b>7. УФ-спектроскопия.</b>	Анализ УФ-спектров	4 / 0.12
<b>8. Спектроскопия ЯМР.</b>	Анализ спектров ЯМР	4 / 0.12
<b>9. Спектроскопии для изучения твердого тела.</b>	Анализ спектров РФЭС	4 / 0.12
		<b>18 / 0.5</b>

#### **2.5. ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ**

<b>Раздел, тема дисциплины</b>	<b>Наименование работы</b>	<b>Объем учебного времени, час. / зачетные единицы</b>
<b>6. ИК- и КР-спектроскопия.</b>	Анализ ИК- и КР-спектров	9 / 0.25
<b>7. УФ-спектроскопия.</b>	Анализ УФ-спектров	9 / 0.25
<b>8. Спектроскопия ЯМР.</b>	Анализ спектров ЯМР	9 / 0.25
<b>9. Спектроскопии для изучения твердого тела.</b>	Анализ спектров РФЭС	9 / 0.25
		<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 CNH 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. С.С. Cramer. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. Second addition. John Wiley and Sons, Ltd. 596 p.

### **7.2. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА**

1. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М., 1978.
2. Сильверштейн Р., Брасслер Г., Морил Т. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М: Мир, 1977.
3. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ. М: Мир, 1992.
4. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. М: Высшая школа, 1971.

### **7.3 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

Кожевников Д.Н., Прохоров А.М. Электронная абсорбционная и люминесцентная спектроскопия. Теория и практика. Методические указания. Екатеринбург: УрФУ. 2010.

## ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ

за \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ учебный год

В рабочую программу курса ОД.А.06, «Теория методов исследования вещества в химии», цикл ОД.А.00 «Обязательные дисциплины» основной образовательной программы подготовки аспиранта по специальности 02.00.03 – **Органическая химия** (отрасль - химические науки), вносятся следующие дополнения и изменения:

Номер изменения	Номера листов		Основание для внесения изменений	Подпись	Расшифровка подписи	Дата	Дата введения изменения
	замененных	новых					