

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

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2015 г.

Протокол № \_\_

**УТВЕРЖДАЮ**

Директор ИОС УрО РАН

академик РАН \_\_\_\_\_ В.Н. Чарушин

«\_\_» \_\_\_\_\_ 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Теория методов исследования вещества в химии**

Шифр и название направления подготовки **18.06.01 Химическая технология**

Направленность **05.17.04 Технология органических веществ**

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

Форма обучения: **Очная (Заочная)**

**Статус дисциплины:**

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

**Автор:**

Ведущий научный сотрудник ИОС УрО РАН,

д.х.н., проф.

Д.Н. Кожевников

**Екатеринбург – 2015**

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 05.17.04 – Технология органических веществ, в соответствии с Программой-минимумом кандидатского экзамена по специальности 05.17.04 «Технология органических веществ», 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 и квантово-химических расчетов при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований.

**Задачи дисциплины** – сформировать у аспирантов:

- представления о физических основах спектральных методов исследования вещества, а также методах и подходах для анализа спектральных данных;
- навыки квантово-химических расчетов и умения использовать их для понимания строения и свойств молекул, а также 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
- проводить квантово-химические расчеты геометрии, энергии, термодинамических характеристик и свойств вещества
- использовать квантово-химические расчеты для анализа спектральных данных
- находить, анализировать и адаптировать описанные методики
- 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 использования компьютерных программ для проведения квантово-химических расчетов и визуализации их результатов
- 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 05.17.04 – Технология органических веществ.

## 2 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

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

Форма обучения (вид отчетности) - 1 год аспирантуры; вид отчетности – экзамен кандидатского минимума.

Вид учебной работы	Объем часов / зачетных единиц
<b>Трудоемкость изучения дисциплины</b>	108 / 3.0
<b>Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)</b>	72 / 2.0
в том числе:	
лекции	18 / .0.5
практические занятия	18 / .0.5
лабораторные работы	36 / 1.0
<b>Самостоятельная работа аспиранта (всего)</b>	36 / 1.0
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

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц			
		лекции	практические занятия	лабораторные работы	Самостоятельная работа
1	Основные постулаты квантовой механики	4/0.11	0	0	1/0.028
2	Квантово-химические расчеты	3/0.083	6/0.165	4/0.11	14/0.385
3	Электронное строение атома	1/0.028	0	0	1/0.028
4	Электронное строение молекул	1/0.028	0	0	1/0.028
5	Электромагнитное излучение и его взаимодействие с веществом	1/0.028	0	0	1/0.028

6	Возбужденные состояния. Образование и свойства, не зависящие от времени	2/0.055	2/0.055	4/0.11	4/0.11
7	Возбужденные состояния: явления, зависящие от времени	2/0.055	2/0.055	2/0.06	4/0.11
8	ИК-спектроскопия	4/0.11	2/0.055	2/0.055	4/0.11
9	Спектроскопия ЯМР	2/0.055	2/0.055	6/0.165	6/0.165
	<i>Итого:</i>	18/0,5	18/0,5	18/0,5	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**

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
		<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	Визуализация и анализ	4 / 0.11

расчеты	молекулярных орбиталей	
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 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. С. J. 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 веществ в химии», цикл ОД.А.00 «Обязательные дисциплины» основной образовательной программы подготовки аспиранта по специальности 05.17.04 – Технология органических веществ (отрасль - технические науки), вносятся следующие дополнения и изменения:

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