

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева
Российской академии наук
(ИМХ РАН)**

УТВЕРЖДАЮ



И.Л. Федюшкин

«04» *сентября* 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«СОВРЕМЕННЫЕ АСПЕКТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ
ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»**

Б1.В.ДВ.2 «Вариативная часть»; раздел «Дисциплины по выбору» основной профессиональной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации **04.06.01 Химические науки**

Направленность (профиль) **02.00.03 «Органическая химия»**

Форма обучения **очная**

Нижний Новгород

2015

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 г. № 869.

Разработчики:

Зав. лабораторией НССХ, д.х.н.

С.Ю. Кетков

Программа принята на заседании Ученого совета ИМХ РАН

Протокол № 10 от « 24 » июня 2015 г.

Ученый секретарь, к.х.н.



К.Г. Шальнова

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели дисциплины:

Формирование представлений о взаимосвязи понятий молекулярное строение – электронная структура – физико-химические свойства органических соединений. Развитие представлений об основных принципах фотоэлектронной спектроскопии и ее современных вариантах. Формирование представлений о современных методах теоретического изучения структуры комплексов металлов с органическими лигандами.

Задачи дисциплины:

- изучение основ фотоэлектронной и фотоионизационной спектроскопии, методов квантово-химических расчетов;
- формирование представлений о современном аппаратном и программном обеспечении методов исследования электронного строения металлокомплексов;
- формирование навыков и умений в области анализа электронной структуры органических соединений и работы с современными электронными источниками информации.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Данная дисциплина относится к группе дисциплин по выбору в Вариативной части образовательной компоненты основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки *04.06.01 «Химические науки»* по специальности *02.00.03 Органическая химия*.

Для успешного усвоения дисциплины аспирант должен знать основные теоретические положения следующих дисциплин:

Требования к «входным» знаниям, умениям и готовностям аспирантов, приобретенным в результате усвоения предшествующих частей ООП, и необходимые при усвоении специальной дисциплины:

- знание теоретических основ и владение практическими навыками, полученными при изучении следующих предшествующих дисциплин: физическая химия, квантовая химия, органическая химия, физико-химические методы анализа;
- владение навыками использования учебных электронных изданий и ресурсов сети Интернет.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

УК-1 - 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-4 - готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках;

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

ОПК-2 - готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук;

ПК-2 - способность ставить и решать инновационные задачи в области органической химии, связанные с получением органических веществ, их практическим применением, определением строения и реакционной способности с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний;

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

Знать: современные подходы к изучению электронной структуры органических соединений; физические основы методов фотоэлектронной и фотоионизационной спектроскопии;

Уметь: анализировать спектральные данные и устанавливать их взаимосвязь с электронным строением металлокомплексов;

Владеть: квантово-химическими методами изучения органических соединений;

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 часа). Дисциплина изучается в 5 семестре (3 год обучения). Дисциплина состоит из 7 разделов.

4.1 Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб/сем.	Прак.	КСР.		
	Современные аспекты исследования электронного	72	36	-	35	-	1	36	зачет

	строения органических соединений								
--	----------------------------------	--	--	--	--	--	--	--	--

4.2 Содержание дисциплины

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы и трудоемкость (в часах)				Самостоят. работа
		Лек.	Лаб./ сем.	Пр.	КСР	
1	Место фотоэлектронной спектроскопии в ряду спектральных методов исследования координационных соединений	-	5	-	-	5
2	Физические принципы, инструментальное оформление и анализ данных в фотоэлектронной спектроскопии металлокомплексов.	-	6	-	-	6
3	Современные методы лазерной ионизационной спектроскопии в координационной и металлоорганической химии.	-	5	-	-	5
4	Квантово-химические расчеты координационных соединений	-	5	-	-	5
5	Методы расчета термодинамических свойств органических веществ и параметров реакций	-	5	-	1	5
6	Использование электронных исторических факторов для поиска связи между строением и свойствами соединения	-	5	-	-	5
7	Электронная спектроскопия	-	5	-	-	5

	поглощения и испускания					
--	-------------------------	--	--	--	--	--

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий (лекции, семинары и т.д.)
1	Место фотоэлектронной спектроскопии в ряду спектральных методов исследования координационных соединений	Сравнение ФЭС с «классическими» спектральными методами. История развития фотоэлектронной спектроскопии. Современные варианты ФЭС: спектроскопия с варьируемой энергией фотонов, анализ углового распределения фотоэлектронов, ФЭС высокого разрешения, ФЭС для решения химических задач.	Лабораторные работы, самостоятельная работа
2	Физические принципы, инструментальное оформление и анализ данных в фотоэлектронной спектроскопии металлокомплексов.	Вероятность процесса фотоионизации - Сечение ионизации - Модель Гелиуса - Параметры асимметрии Инструментальное оформление ФЭС - Общая схема спектрометра - Вакуумная техника - Источники излучения - Энергоанализаторы - Детекторы - Требования к образцам - Примеры установок УФ фотоэлектронная спектроскопия координационных соединений в газовой и конденсированной фазах. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия металлокомплексов. Орбитальные и зарядовые эффекты.	Лабораторные работы, самостоятельная работа

3	Современные методы лазерной ионизационной спектроскопии в координационной и металлоорганической химии.	REMPI, ZEKE, MATI спектроскопия: принципы работы, анализ спектров, результаты для сэндвичевых комплексов переходных металлов.	Лабораторные работы, самостоятельная работа
4	Квантово-химические расчеты координационных соединений	Теория функционала плотности и анализ топологии электронной плотности в квантово-химических расчетах координационных соединений. Современные пакеты квантово-химических программ и программ для анализа топологии электронной плотности: HyperChem, Gaussian, PC Gamess, AIMAll, Multiwfn.	Лабораторные работы, самостоятельная работа

5. Образовательные технологии

При реализации учебной работы используются активные образовательные технологии (семинары, дискуссии), технологии интерактивного обучения (презентации), информационно-коммуникативные технологии (компьютер, средства мультимедиа).

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов.

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Изучение курса базируется на следующих видах самостоятельной работы обучающегося: в читальном зале библиотеки, доступ к лабораторному оборудованию, научным приборам, базам данных, к ресурсам Интернет.

а). Выбранная форма контроля знаний: зачет

б). Контрольные вопросы к зачету:

1. История развития метода фотоэлектронной спектроскопии.
2. Классические и современные варианты ФЭС.
3. УФ фотоэлектронная спектроскопия координационных соединений в газовой и конденсированной фазах.
4. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия металлокомплексов. Орбитальные и зарядовые эффекты.

5. Современные методы лазерной ионизационной спектроскопии в исследовании строения координационных соединений.
6. Инструментальное оформление в методах фотоэлектронной и фотоионизационной спектроскопии. Источники излучения, энергоанализаторы, детекторы.
7. Методы квантово-химических расчетов в изучении строения координационных соединений.
8. Современные пакеты программ для квантово-химических расчетов молекул металлокомплексов и визуализации расчетных данных.

в) критерии оценок выполнения задания:

Зачтено	Знание основного содержания разделов дисциплины, допускаются неточности, нарушения в последовательности изложения материала. Правильное применение теоретических знаний для решения практических задач. Допускаются незначительные ошибки в решении расчетных задач.
Незачтено	Не знает значительной части основного содержания разделов дисциплины. Имеющихся знаний недостаточно для освоения дисциплин последующих курсов. Не может решать простые основные расчетные и качественные задачи.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Нефедов В.И., Вовна В.И. Электронная структура химических соединений. М.: Наука, 1987.
2. Мазалов Л.Н. Рентгеновские спектры и химическая связь. Новосибирск: Наука, 1982
3. К. Зигбан и др. Электронная спектроскопия. М.: Мир, 1971, 493 с.
4. Ellis A., Feher M., Wright T. Electronic and Photoelectron Spectroscopy, Cambridge University Press: Cambridge, 2005, 302 pp.
5. Hüfner S. (Ed.), Very high resolution photoelectron spectroscopy. Springer: Berlin, 2007, 409 pp.

6. Hüfner S. Photoelectron spectroscopy: principles and applications, Springer: Berlin, 2007, 662 pp.
7. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир, 2001. 532 с.
8. Young D.C., Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, John Wiley & Sons, Inc.:N.Y., 2001, 434 pp.

б) дополнительная литература:

1. Ketkov S.Yu., Photoelectron Spectroscopy and Quantum Mechanical Calculations of Organometallic Complexes / In: Spectroscopic Properties of Inorganic and Organometallic Compounds, V.40, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2009, p. 216-244.2. A.
2. Green J.C., Decleva P., Photoionization cross-sections: a guide to electronic structures, Coord. Chem. Rev., 2005. V.249. P.209-228.
3. Schlag E.W., ZEKE spectroscopy. Cambridge University Press: Cambridge, 1998, 277 pp.
4. Cundari T.R. (Ed.). Computational organometallic chemistry. Marcel Dekker: N.Y., 448 pp.
5. Koch W., Holthausen M.C. A chemist's guide to density functional theory, Wiley-VCH: Berlin, 2000, 294 pp.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

пакеты программ PC Gamess, ChemCraft, AIMAll, Multiwfn;

сайты Американского химического общества (www.pubs.acs.org) и Королевского химического общества (www.rsc.org).

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Современный компьютер, мультимедиапроектор, экран, доска.