

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

УТВЕРЖДАЮ

Директор

Чл.-корр. РАН

_____ И.Л. Федюшкин

« ____ » _____ 20 ____ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«КИНЕТИКА ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ»

Б1.В.ОД.4 «Вариативная часть»; раздел «Обязательные дисциплины» 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) **02.00.04 «Физическая 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 НОПС, к.ф.-м.н. Менсов С.Н.

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 знаний и умений в области химической кинетики и фотохимии.

Задачи дисциплины:

- Изучение особенностей фотопоглощения и фототрансформаций металлоорганических соединений (МОС);
- Знакомство с методами исследования кинетики фотореакций МОС и классификацией фотопревращений МОС;
- Формирование навыков и умений в области построения кинетических моделей протекания реакций;
- Изучение путей и кинетических закономерностей фотоокисления МОС;

2. Место дисциплины в структуре ООП

Настоящая дисциплина представляет собой обязательную дисциплину в разделе Вариативная часть основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» по специальности 02.00.04 – *Физическая химия*.

Требования к «входным» знаниям, умениям и готовностям обучающегося, необходимые при усвоении специальной дисциплины:

- знание теоретических основ и владение практическими навыками по проведению кинетических исследований, методам физико-химического 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;

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

ПК-1 - углубленное знание теоретических и методологических основ физической химии, умение проводить анализ и отбор задач и проблем, самостоятельно ставить цель исследования наиболее актуальных проблем физической химии.

ПК-2 способность ставить и решать инновационные задачи, связанные с разработкой новых химических технологий, изучением свойств веществ с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний, аналитических методов и сложных моделей в условиях неопределенности, умение работать с аппаратурой, выполненной на базе микропроцессорной техники и персональных компьютеров для решения практических задач физической химии;

ПК-3 - умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений;

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

Знать: особенности фотопревращений МОС;

Уметь: строить кинетические модели фотореакций МОС;

Владеть: представлениями о практических аспектах применения фотопревращений МОС.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц (144 часов).

Дисциплина изучается в 6 и 7 семестре (3 и 4 годы обучения). Дисциплина состоит из 5 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.		
1	Кинетика химических реакций	144	72	70	-	-	2	72	Зачет

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу аспирантов и трудоемкость (в часах)				Самостоят. работа
		Лек.	Лаб./ сем.	Пр.	КСР	
1	Особенности фотохимии металлоорганических соединений	14	-	-	-	14
2	Классификация реакций по типам МОС и направлений превращения	14	-	-	-	14
3	Фотохимия МОС непереходных металлов	14	-	-	-	14
4	Фотохимия МОС переходных металлов	14	-	-	1	14
5	Изучение кинетических закономерностей и механизмов фотохимических реакций на примере фотораспада и фотоокисления карбонил переходных металлов и их производных	14	-	-	1	16

4.2.2. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий (лекции, семинары и т.д.)
1	Особенности фотохимии МОС	Специфика электронного строения МОС Специфика спектров поглощения МОС Координационно ненасыщенные частицы, образующиеся в процессе фотолиза МОС	Лекции, самостоятельная работа
2	Классификация реакций по типам МОС и по направлениям реакций.	Фотолиз органических производных непереходных металлов. Фотолиз металлоциклов и соединений с двойной связью "металл-металл". Фотолиз карбонил переходных металлов. Фотолиз производных переходных металлов, включающих другие лиганды, помимо СО.	Лекции, самостоятельная работа

		Фотолиз биметаллорганических соединений. Фотоокисление. Кластеризация, образование новых связей металл-металл. Замещение лиганда. Выделение свободного металла. Продукты реакция карбенов и карбеноидов. Переметаллирование.	
3	Фотохимия МОС непереходных металлов	Закономерности фотолиза одинарных связей на примере реакций соединений со связью Si-Ge, Ge-Ge, Si-Sn. Пути превращения металлоцентрированных радикалов. Образование и пути превращения карбеноидных частиц в процессе фотолиза металлоциклов и соединений со связью "элемент-элемент". Фотолитические превращения элементоорганических перекисей непереходных металлов.	Лекции, самостоятельная работа
4	Фотохимия МОС переходных металлов	Фотолиз соединений со связью металл-металл. Реакции радикалов, центрированных на переходном металле. Отрыв лигандов от радикала. Клеточный эффект. Образование и реакции карбеноидных частиц на примере фотолиза титаноцена ключевые направления фотохимического превращения карбонил металлов	Лекции, самостоятельная работа
5	Изучение кинетических закономерностей и механизмов фотохимических реакций на примере фотораспада и фотоокисления карбонил переходных металлов в растворах	Фотораспад карбонил железа и кобальта в растворах. Фотоокисление карбонил железа и кобальта в растворах. Фотораспад алкен-карбонильных комплексов переходных металлов.	Лекции, самостоятельная работа

5. Образовательные технологии

При реализации учебной работы используются активные образовательные технологии (лекции, дискуссии, доклады), 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.

Самостоятельное изучение отдельных разделов курса обеспечивается: доступом к базам данных, к ресурсам Интернет, к лабораторному оборудованию, к научным приборам центра коллективного пользования.

- а). Выбранная форма контроля знаний: зачет
- б). Контрольные вопросы к зачету:

1. Особенности спектров поглощения арильных производных непереходных металлов, π и σ -комплексов переходных металлов.
2. Первичные и конечные продукты фотолиза металлоциклов и соединений с двойной связью "металл-металл".
3. Первичные и конечные продукты фотолиза алкильных и арильных производных кремния, германия, олова.
4. Первичные и конечные продукты фотолиза карбониллов металлов.
5. Первичные и конечные продукты фотолиза соединений со связью металл-металл.
6. Примеры и механизм фотолиза МОС с образованием свободного металла.
7. Примеры и механизмы фотореакций МОС с образованием новых связей «металл-металл» (кластеров).
8. Примеры фотореакций МОС с образованием промежуточных карбеновых и карбеноидных частиц. Конечные продукты таких реакций.
9. Примеры и механизм фотореакций МОС с замещением лигандов.
10. Примеры фотореакций МОС с образованием свободных металлоцентрированных радикалов. Роль клеточного эффекта в протекании таких реакций.
11. Механизмы фотоокисления МОС с π и σ - связями металл-углерод. Продукты частичного и полного фотоокисления.
12. Особенности фотолиза металлоциклов кремния, германия, олова.
13. Особенности фотопревращений элементоорганических перекисей непереходных металлов.
14. Особенности реакционной способности радикалов и карбеноидных частиц, центрированных на переходном металле, возникающих в ходе фотолиза МОС.
15. Схема и уравнения, описывающие кинетику реакции для фотолиза пентакарбонила железа в инертных растворителях.
16. Схема и уравнения, описывающие кинетику реакции для фотолиза октакарбонила дикобальта в инертных растворителях.
17. Схема и уравнения, описывающие кинетику реакции для фотолиза стирол-хром-рикарбонила.

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

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Калверт Дж., Питтс Дж. Фотохимия. М.: Мир. 1968. 671с.
2. Сыркин В.Г. Карбонилы металлов. М.: Химия.1983. 196с.
3. Уэйн Р. Основы и применения фотохимии. М.: Мир. 1991. 304с.
4. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М.: Мир. 1978. 446с.

б) дополнительная литература:

1. Рабек Я. Экспериментальные методы в фотохимии и фотофизике. В 2-х томах. М.: Мир. 1985. 845с.
2. Спирина И.В., Масленников В.П. Реакции термического, фотолитического и окислительного превращений гомолигандных карбониллов металлов VI-VIII групп периодической системы. // Усп.химии. 1994. Т.63, №1. С.43-56.
3. Мищенко О.Г. Кинетические особенности и механизм фотопревращения орто- и пара-хинонов в среде насыщенных углеводородов. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук. Нижний Новгород. 2009.
4. Bitterwolf T.E. Organometallic photochemistry at the end of its first century. J. Organomet. Chem. 2004. Vol. 689. Issue 24. PP. 3939-3952.
5. Leadbeater M. Enlightening organometallic chemistry: the photochemistry of Fe (CO)₅ and the reaction chemistry of unsaturated iron carbonyl fragments. Coordination Chemistry Reviews. 1999. Vol. 188, Issue 1, PP. 35-70.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Американского химического общества (www.pubs.acs.org)

Королевского химического общества (www.rsc.org).

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Современный компьютер, мультимедиапроектор, экран, доска