

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

УТВЕРЖДАЮ



И.Л. Федюшкин

«07» *сентября* 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«КЛАССИФИКАЦИЯ И ОБЩИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»**

Б1.В.ОД.3 «Вариативная часть»; раздел «Обязательная дисциплина» 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) **02.00.08 «Химия элементоорганических соединений»**

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:

Ведущий научный сотрудник лаборатории ОПНМ, д.х.н. А.А. Скатова

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:

Подготовка высококвалифицированных специалистов в области химии элементоорганических соединений. Формирование знаний о новейших тенденциях в области теоретической химии ЭОС.

Задачи дисциплины:

- Сформировать основные теоретические понятия современной химии элементоорганических соединений (ЭОС);
- Дать информацию о строении, классификации и основных характеристиках ЭОС;
- Изучить основные типы реакций с участием ЭОС;
- Сформировать навыки использования современных физических методов исследования строения ЭОС и механизмов реакций с их участием.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Данная дисциплина относится к группе обязательных дисциплин 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 02.00.08 «Химия элементоорганических соединений».

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

- "Органическая химия" (теоретические представления органической химии, знания о составе, строении и свойствах основных классов органических соединений, владение основами органического синтеза, основные положения о механизмах органических реакций);
- "Химия элементоорганических соединений" (теоретические представления о природе связи и закономерностях структурного строения органических соединений переходных и непереходных металлов, химические свойства элементоорганических соединений).

3. Требования к результатам освоения дисциплины

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 химии элементоорганических соединений, умение работать с аппаратурой и приборами, предназначенными для исследований элементоорганических веществ;

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

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

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

Знать: важнейшие понятия современной элементоорганической химии – классификацию, основные характеристики, особенности строения, свойства и реакционную способность элементоорганических соединений (ЭОС).

Уметь: оценить стабильность и лабильности элементоорганических соединений.

Владеть: информацией об основных типах реакций с участием ЭОС; современными физическими методами исследования строения и реакционной способности ЭОС.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы (144 часа.) Дисциплина изучается в 3,4 семестрах (2 год обучения). Дисциплина состоит из 14 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.	Классификация и общие характеристики ЭОС	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 и трудоемкость (в часах)				Самостоят. работа
		Лек.	Лаб./сем.	Пр.	КСР	
1.	Введение в предмет химии элементоорганических соединений (ЭОС).	6	-	-	-	5
2.	Основные положения квантовой химии как основы исследования структуры и электронного строения ЭОС.	5	-	-	-	5
3.	Теоретические представления об электронном строении элементоорганических соединений.	6	-	-	-	5
4.	Сопряженные молекулы как лиганды в ЭОС. Концепция ароматичности в химии ЭОС.	5	-	-	-	5
5.	Природа и классификация химических связей в элементоорганических соединениях.	5	-	-	-	5
6.	Способы оценки стабильности и лабильности ЭОС. Правило эффективного атомного номера.	5	-	-	-	5
7.	Теоретические основы стереохимии ЭОС.	5	-	-	-	5
8.	Реакционная способность элементоорганических соединений. Классификация основных типов реакций с участием ЭОС.	5	-	-	-	5
9.	Влияние полярности среды на реакционную способность ЭОС. Сольватация. С-Н-кислотность.	4	-	-	1	5
10.	Физические методы исследования структуры и электронного строения ЭОС: спектроскопия ядерного магнитного резонанса.	5	-	-	-	6
11.	Области применения масс-спектрометрии в химии ЭОС.	5	-	-	-	5
12.	Использование метода рентгеноструктурного анализа для определения строения ЭОС.	5	-	-	-	6
13.	Применение методов оптической спектроскопии (ИК-, УФ-, КР) в химии ЭОС.	5	-	-	-	5
14.	Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) в химии ЭОС.	4	-	-	1	5

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий (лекции,

			семинары и т.д.)
1	Введение в предмет химии элементоорганических соединений (ЭОС).	Основные этапы развития и ключевые открытия химии ЭОС. Классификация элементоорганических соединений (ЭОС) по электроотрицательности элементов.	Лекции, самостоятельная работа
2	Основные положения квантовой химии как основы исследования структуры и электронного строения ЭОС.	Основные положения квантовой химии. Уравнение Шредингера для атомно-молекулярной системы как основа для теоретического исследования ее структуры и электронного строения. Электронное строение атомов и их ионов. Атомные орбитали и их классификация.	Лекции, самостоятельная работа
3	Теоретические представления об электронном строении элементоорганических соединений.	Теоретические методы моделирования структуры и электронного строения молекул. Адиабатическое приближение. Понятие о поверхности потенциальной энергии молекулы. Метод молекулярных орбиталей (МО) как основа современной квантовой химии. Основные принципы построения неэмпирических и полуэмпирических квантово-химических методов. Использование методов квантовой химии для расчетов наблюдаемых свойств молекул. Анализ электронного строения молекул в терминах эффективных зарядов на атомах и заселенностей (порядков) связей.	Лекции, самостоятельная работа
4	Сопряженные молекулы как лиганды в ЭОС. Концепция ароматичности в химии ЭОС.	Сопряженные молекулы как лиганды в ЭОС. Электронное строение сопряженных молекул в π -электронном приближении. Метод Хюккеля. Схемы π -электронных уровней энергий и π -МО аллила, бутадиена, аниона циклопентадиенила, бензола, циклооктатетраена. Концепция ароматичности в химии ЭОС. Примеры металлоорганических ароматических систем.	Лекции, самостоятельная работа
5	Природа и классификация химических связей в элементоорганических соединениях.	Природа химических связей в ЭОС. Гибридные орбитали и принципы их использования в качественной теории химического строения. Классификация типов химических связей в ЭОС. Природа связи в олефиновых, ацетиленовых, циклопентадиенильных и ареновых комплексах переходных металлов. Кратные связи элемент–углерод и элемент–элемент. Многоцентровые связи. Симметрия молекул и ее использование в теории химического строения ЭОС. Молекулярные орбитали в олефиновых, аллильных, циклопентадиенильных и ареновых комплексах. Химические связи в электронодефицитных молекулах (на	Лекции, самостоятельная работа

		примерах простейших и полиэдрических гидридов бора и карборанов).	
6	Способы оценки стабильности и лабильности ЭОС. Правило эффективного атомного номера.	Качественные способы оценки стабильности ЭОС. Правило эффективного атомного номера. Принцип изоlobalной аналогии и его приложения.	Лекции, самостоятельная работа
7	Теоретические основы стереохимии ЭОС.	Теоретические основы стереохимии ЭОС. Понятие о конформациях и конфигурациях. Координационные полиэдры, характерные для координационных чисел 4, 5, 6. Хиральность полиэдров с моно- и бидентатными лигандами. Планарная хиральность и оптическая активность металлокомплексов с π -олефиновыми, π -циклопентадиенильными, π -ареновыми лигандами.	Лекции, самостоятельная работа
8	Реакционная способность элементоорганических соединений. Классификация основных типов реакций с участием ЭОС.	Основные типы реагентов (электрофилы, нуклеофилы, протофилы, радикафилы, карбеноиды). Классификация основных типов реакций с участием ЭОС. Реакции по связи металл-лиганд (реакции замещения, присоединения, элиминирования, фрагментации, внедрения, окислительного присоединения, восстановительного элиминирования). Превращения лигандов в координационной сфере металлов (структурно нежесткие соединения, внутримолекулярные перегруппировки и молекулярная динамика ЭОС (таутомерия, металлотропия, внутренние вращения вокруг связи металл-лиганд). Окислительно-восстановительные превращения металлоорганических соединений.	Лекции, самостоятельная работа
9	Влияние полярности среды на реакцию способность ЭОС. Сольватация. С-Н-кислотность.	Различия в строении и свойствах ЭОС в газовой, жидкой и твердой фазах. Роль полярности среды и специфической сольватации. Ионы и ионные пары, их реакция способность. Равновесная С-Н-кислотность, шкалы С-Н-кислотности, влияние строения С-Н-кислот на равновесную С-Н-кислотность, кинетическая кислотность С-Н-кислот.	Лекции, самостоятельная работа
10	Физические методы исследования структуры и электронного строения ЭОС: спектроскопия ядерного магнитного резонанса.	ЯМР-спектроскопии (импульсная ЯМР-фурье спектроскопия, динамический ЯМР) в исследовании строения и реакционной способности ЭОС. Физические и теоретические основы метода. Понятие об основных ЯМР-параметрах: химическом сдвиге, константах спин-спиновой взаимодействия, временах релаксации. Области применения в химии ЭОС: изучение строения и динамики молекул, определение примесей.	Лекции, самостоятельная работа

11	Области применения масс-спектрометрии в химии ЭОС.	Масс-спектрометрия. Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии ЭОС: установление состава и строения молекул, качественный и количественный анализ смесей (хроматомасс-спектрометрия), определение микропримесей, изотопный анализ, измерение термодинамических параметров (энергии ионизации молекул, энергии появления ионов, энергии диссоциации связей), изучение ионно-молекулярных реакций, газофазная кислотность и основность молекул.	Лекции, самостоятельная работа
12	Использование метода рентгеноструктурного анализа для определения строения ЭОС.	Метод рентгеноструктурного анализа (РСА). Физические и теоретические основы метода. Области применения в химии ЭОС: установление строения молекул и кристаллов, исследование природы химических связей. Фото- (ФЭС) и рентгенофотоэлектронная (ЭСХА) спектроскопии. Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: изучение электронного строения молекул, измерение энергий ионизации.	Лекции, самостоятельная работа
13	Применение методов оптической спектроскопии (ИК-, УФ-, КР) в химии ЭОС.	Оптическая спектроскопия (ИК-, УФ-, КР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: установление строения молекул, изучение динамики молекул, измерение концентрации. Применение симметрии при интерпретации экспериментальных спектров.	Лекции, самостоятельная работа
14	Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) в химии ЭОС.	Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Физические и теоретические основы методов. Применение в химии ЭОС: установление строения радикалов, изучение динамики молекул и механизмов радикальных реакций.	Лекции, самостоятельная работа

5. Образовательные технологии

При проведении лекций и семинаров используют современные мультимедийные возможности (программный пакет Microsoft Office PowerPoint) и проекционное оборудование. Практические работы проводятся в оборудованных научных лабораториях, обучаемые непосредственно участвуют в научной работе и выполнении исследовательских проектов. В распоряжении аспирантов компьютеры с установленным специальным программным обеспечением и доступными Интернет-ресурсами для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

**6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов.
Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

Целью самостоятельной работы является овладение навыками работы с литературой (в читальном зале библиотеки, с доступом к ресурсам Интернет), более углубленное изучение отдельных разделов дисциплины при подготовке лекциям, при выполнении индивидуальных заданий.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме контроля самостоятельной работы, докладов аспирантов по изучаемой тематике. Итоговый контроль проводится в виде зачета. Зачет проставляется автоматически, если аспирант активно работал на лекциях, выступал с докладами и при условии выполнения всех запланированных программой работ.

Вопросы для самоконтроля:

1. Ключевые открытия химии ЭОС.
2. Классификация ЭОС по электроотрицательности элементов.
3. Электронное строение атомов, уравнение Шредингера, типы атомных орбиталей, метод молекулярных орбиталей.
4. Использование методов квантовой химии для расчетов наблюдаемых свойств молекул.
5. Сопряженные молекулы как лиганды в ЭОС. Метод Хюккеля. Концепция ароматичности в ЭОС.
6. Природа и классификация химических связей в ЭОС.
7. Правило эффективного атомного номера. Принцип изолобальной аналогии.
8. Стереохимия ЭОС, хиральность и оптическая активность металлокомплексов.
9. Классификация реакций с участием ЭОС: реакции по связи металл–лиганд, превращения лигандов в координационной сфере металла, окисление-восстановление ЭОС.
10. Влияние полярности среды на реакционную способность ЭОС. Сольватация. С-Н-кислотность.
11. Физические методы исследования строения ЭОС и механизмов реакций с участием ЭОС: спектроскопия ЯМР, ЭПР, ИК, УФ, КР, масс-спектрометрия, рентгеноструктурный анализ.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Металлоорганическая химия, К. Эльшенбройх, пер. с нем., М., БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. 746 с.
2. Ю.А. Ольдекоп, Введение в элементоорганическую химию. Минск: Наука и техника, 1973.
3. Металлоорганические соединения переходных металлов, М. Грин, М., Мир, 1972.
4. Механизмы реакций металлоорганических соединений, О.А. Реутов, И.П. Белецкая, В.И. Соколов, М., Химия, 1972.
5. Химическая Энциклопедия; т. 1-5; М, Большая Российская Энциклопедия; 1988-1998.
6. π -комплексы металлов, М. Херберхольд, пер. с англ., М., Мир, 1975.
7. Физические методы в химии. Т. 2., Р. Драго, пер. с англ., М., Мир, 1981.
8. Кванты: справочник концепций, П. Эткинс, пер. с англ., М., Мир, 1977.
9. Абакумов Г.А. Введение в химию координационных соединений: Учебное пособие. Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2007.

б) дополнительная литература:

1. В.В. Шарутин, В.С. Сенчурин, Именные реакции в химии элементоорганических соединений, Челябинск, Издательский центр ЮУрГУ, 2011.
2. Гутман В. Химия координационных соединений в неводных растворах. М.: Мир, 1971.
3. Comprehensive organometallic chemistry: The synthesis, reactions and structures of organometallic compounds. Oxford, 1982. Vol. 1-9.
4. Dictionary of Organometallic compounds. London, 1984. Vol. 1-3.
5. Кукушкин Ю.Н. реакционная способность координационных соединений. Л.: Химия, 1987.
6. Травень В.Ф., Органическая химия: Учебник для вузов, в 2-х т. М.: Академкнига, 2008.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

<http://pubs.acs.org>

<http://www.wiley-vch.de/publish/en/journals>

<http://www.journals.elsevier.com/journal-of-organometallic-chemistry/>

<http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/home>

<http://www.thieme-connect.com/ejournals/home>

<http://search.tandf.co.uk/results.asp>

<http://www.rsc.org/Publishing/Journals/articlefinder.asp>

<http://springer.metapress.com>

<http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/ENTRANCE.cgi>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лекционные занятия по курсу проводятся в учебном классе. Практические работы по физико-химическим методам анализа элементоорганических соединений выполняются в специализированных лабораториях института, оснащенных научными приборами. Работы с использованием ЭОС проводятся на рабочих местах в лабораториях института в рамках тематики научных исследований как по известным методикам, так и по вновь разрабатываемым. Для самостоятельной подготовки используются персональные компьютеры и читальный зал библиотеки.