

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ.Н.С.КУРНАКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИОНХ РАН)

Рабочая программа дисциплины
ФИЗИЧЕСКИЕ, МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Направление подготовки
04.06.01 – ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль) программы
Физическая химия

Квалификация (степень)
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Нормативный срок обучения – 4 года
Форма обучения – очная

Москва
2018 г.

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целью учебного курса «Физические, математические и квантово-химические методы исследований» является ознакомление аспирантов с основными тенденциями развития физико-химических и квантово-химических методов исследования атомов, молекул и различных конденсированных веществ и систем.

Основными задачами изучения учебного курса является формирование у аспирантов базовых знаний по наиболее развитым современным методам анализа, квантово-химическим подходам и вычислительным методам вместе с овладением навыками неэмпирического квантово-химического моделирования на современном уровне, включая пакеты вычислительных программ.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Настоящая дисциплина «Физические, математические и квантово-химические методы исследований» - модуль 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. Дисциплина относится к группе дисциплин по выбору.

Обучающийся по данной дисциплине должен иметь фундаментальные представления по физической химии. Для изучения данной дисциплины необходимо высшее образование с освоением курса физическая химия для химических специальностей.

Эта дисциплина является продолжением ряда основополагающих дисциплин, таких как «Физическая химия», «Теоретическая неорганическая химия», изучаемых в ВУЗах. В курсе рассматриваются основные методы анализа неорганических веществ инструментальными, квантово-химическими и математическими методами, включая актуальные направления квантово-химического моделирования и современные неэмпирические подходы к теоретическому описанию структуры и свойств молекул, комплексов, нанокластеров и к изучению реакционной способности веществ, в том числе, в конденсированных средах.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

Универсальные компетенции:

- 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-1);

- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3).

Общепрофессиональные компетенции:

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

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

- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

Профессиональные компетенции:

- способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по специальности 02.00.04 Физическая химия (ПК-1);

- владение методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-2).

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 часа).

Дисциплина изучается на втором году аспирантуры. Дисциплина состоит из 4 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.	Прак	КСР		
1.	Физические, математические и квантово-химические методы исследований	144	56	16	40	-	-	88	кандидатский экзамен по специальности

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел Дисциплины	Виды учебной работы, и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа
		Лек.	Лаб.	Пр.	КСР	

1.	Спектральные, дифракционные и магнитные методы исследования структурных характеристик веществ.	4	10	-	-	22
2.	Методы определения энергетических характеристик веществ	4	10	-	-	22
3.	Математический аппарат квантовой химии.	4	10	-	-	22
4	Квантово-химическое описание молекулярных и кристаллических систем.	4	10	-	-	22

4.2.2. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	Спектральные, дифракционные и магнитные методы исследования структурных характеристик веществ.	Колебательные спектры координационных соединений в газовой, кристаллической фазе и в разбавленных водных растворах. Нормальные колебания. Взаимодействие излучения с веществом. Постоянные внешние электрическое и магнитное поля. Дипольный момент и поляризуемость молекул, магнитный момент и магнитная восприимчивость молекул. ИК и КР спектры. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектров. Основы резонансных методов ЭПР, ЯМР и ЯКР. Межмолекулярные взаимодействия. Рентгенофотоэлектронная спектроскопия. Исследование структуры и количественный анализ методом РФЭС. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ. Метод порошка. Индексы отражения. Определение кристаллической структуры. Магнетохимия. Измерение магнитной восприимчивости. Магнитные явления в твердом теле.	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
2	Методы определения энергетических характеристик веществ	Масс-спектрометрия. Ионизация веществ электронным ударом. Изучение состава и свойств паров неорганических соединений. Исследование ионно-молекулярных процессов в парах неорганических соединений. Термический анализ. Термогравиметрия. Калориметрия. Определение термодинамических параметров методами калориметрии. ДСК. Тензиметрия. Основы метода	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

3	Математический аппарат квантовой механики.	<p>Элементы линейной алгебры, теории групп, функционального анализа, уравнений математической физики. Точечная и перестановочная симметрия. Группы симметрии. Пространство Гильберта. Ортонормированный базис. Линейные операторы, их спектр и, собственные векторы. Эрмитовы, унитарные и проекционные операторы. Квантовые скобки Пуассона. Граничные условия (задача Коши). Нестационарное и стационарное уравнение Шредингера. Вариационный метод. Общая теория возмущений.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта
4	Квантово-химическое описание молекулярных и кристаллических систем.	<p>Базовые основы квантовой механики. Оператор кинетической энергии. Гамильтониан. Одномерное уравнение Шредингера. Точно решаемые задачи: гармонический осциллятор. Квазиклассическое приближение. Основы формализма вторичного квантования. Правила отбора. Центральные силы. Теория углового момента. Спин. Квантовые числа. Строение атома: принцип Паули и правила Гунда. Гамильтониан атома, молекулы. Адиабатическое приближение. Факторы Франка-Кондона. Электронные состояния молекулы. Многоэлектронная волновая функция. Симметрия спиновой и пространственной волновой функции. Определитель Слэтера. Принцип суперпозиции и уравнения метода ССП МО ЛКАО. Потенциалы ионизации. Локализованные орбитали, гибридизация, заряды на атомах. Оптимизация базисных наборов. Методы учета электронной корреляции. Матрица плотности, методы функционала плотности. Релятивистские поправки. Псевдопотенциал. Спин-орбитальная связь. Современные пакеты – Gaussian, Gamess, Priroda, Firefly. Симметрия кристаллов. Периодические граничные условия. Основы зонной теории и зоны Бриллюэна. Метод Вигнера-Зейтца. Идеальные кристаллы. Квазикристаллы. Доменные структуры. Дифракция нейтронов. Борновское приближение. Динамика кристаллической решетки. Фононный спектр. Аморфные вещества. Жидкости. Особенности строения полимерных фаз.</p>	Лекции, лабораторные, самостоятельная работа аспиранта

5. Образовательные технологии

Основными образовательными технологиями, используемыми при реализации учебной работы, являются лекции, семинары ведущих отечественных и зарубежных ученых и консультации с преподавателями; проведение лабораторных работ в лаборатории, участие обучаемых в научной работе и выполнение исследовательских проектов.

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

Самостоятельная работа аспирантов предполагает проработку лекционного материала в читальном зале библиотеки, в лабораториях, с доступом к лабораторному оборудованию, приборам, базам данных, к ресурсам Интернет. Кроме того, аспирантам предлагается конспектирование и проработка материала научных докладов на заседаниях Ученого Совета ИОНХ РАН, его секций, диссертационных советов по специальности, участие в работе научных конференций и школ, работу в библиотеке и на сайтах электронных изданий.

Форма контроля знаний – кандидатский экзамен в конце курса, включающий теоретические вопросы.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины аспиранты используют основную и дополнительную литературу, рекомендованную преподавателем. Кроме того, преподаватель может рекомендовать аспиранту ознакомиться с дополнительными материалами методического характера.

Название электронного или печатного ресурса (основная или дополнительная)	Тип	Кол-во экз.
Основная литература: Квантовая механика молекул и квантовая химия, Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. 1991, Издательство МГУ.	печ.	1
Третьяков Ю.Д., Кнотько А.В. Химия твердого тела. Уч.пособие-М.; АКАДЕМИА, 2006-302с.	печ.	1
Строение и динамика молекул. Флайгер У., тт.1 и 2, 1982	печ.	5
Физические методы исследования неорганических веществ. (под ред. А.Б. Никольского). М.: Изд-во АКАДЕМИЯ. 2006.	печ.	1
Л.В. Вилков, Ю.А. Пентин. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М.: Высшая школа. Т.1. 1987.	печ.	2
А. Вест. Химия твердого тела. Тт. 1-2. М.: Мир. 1988	печ.	2
Неудачина Л.К. Физико-химические основы применения координационных соединений, 2014	печ.	1
Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем, VII, 2012	печ.	1
Дополнительная литература: Драго А. Физические методы в химии. М.: Мир. 1981. тт.1-2.	печ.	3
Поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия (SERS): аналитические, биофизические и биомедицинские приложения / Шлюкер С. (ред. ориг. изд.); Лушникова А.А. (пер. с англ. и ред.) М.: Техносфера, 2017;	печ.	1
Майер Вероника Р. Практическая высокоэффективная жидкостная		

хроматография / Майер В.Р.; Петухов Иван Алексеевич [и др.] (пер.). — Изд. 5-е. — М.: Техносфера, 2017.	печ.	1
Естественные и технические науки (ВАК), RUS, 2016 (10, 11), Журнал	печ.	1
Гак Е.З. Магнитные поля и водные электролиты — в природе, научных исследованиях, технологиях / Гак Е.З. — СПб.: Элмор, 2013	печ.	1
Современные проблемы физической химии наноматериалов / акад. А.Ю.Цивадзе, 2008	печ.	1
Сандомирский С.Г. Расчет и анализ размагничивающего фактора ферромагнитных тел, 2015	печ.	1
Порошина И.А. Развитие методов структурной рефрактометрии и кристаллооптики для дисперсных минералов и неорганических соединений, 2014	печ.	1

Интернет-ресурсы:

Институт имеет доступ к информационным ресурсам E-library, Web of Science, Scopus, Springer.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

В ИОНХ РАН имеется необходимая материально-техническая база для проведения лекций и лабораторных занятий по дисциплине «Физические, математические и квантово-химические методы исследования», а именно: учебные аудитории, конференц-залы, презентационное оборудование и т.п. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет и подключенные к международным и российским научным базам данных и электронной библиотеке с основными международными научными журналами.

Лаборатории оснащены современными приборами для синтеза неорганических соединений и материалов: стеклянная и пластиковая химическая посуда отечественного и иностранного производства, спектральное и лабораторное оборудование для рутинных измерений, реакционные установки, вакуумные системы, лабораторные печи, хроматографы.

Программа составлена в соответствии с требованиями следующих нормативных документов:

1. Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации» от 29.12.2012 г. № 273-ФЗ;
2. Приказ Минобрнауки России от 30 июля 2014 г. № 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)»;
3. Приказ Министерства образования и науки РФ от 19.11.2013 №1259 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)».

Автор(ы):

д.х.н., проф. А.С.Алиханян