

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.7.2 «Экспериментальная органическая химия»

по направлению подготовки: 18.03.01 «Химическая технология»

по профилю: «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов»

Квалификация выпускника: БАКАЛАВР

Выпускающая кафедра: ХТПНГ

Кафедра-разработчик рабочей программы: кафедра органической химии

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Экспериментальная органическая химия» являются

- а) формирование знаний о теоретических и экспериментальных методах исследований в химии;
- б) формирование умений по использованию физических методов исследования химических веществ;
- в) раскрытие сущности процессов, на которых основаны современные инструментальные методы исследования структуры химических соединений.

2. Содержание дисциплины «Экспериментальная органическая химия»

Количественная теория двухэлектронных атомов. Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Метод Хартри и Хартри – Фока. Приближенные методы решения уравнений Хартри – Фока. Метод Рутана. Разложение по конфигурациям с базисом Хартри – Фока.

Методы расчета электронных уровней энергии многоатомных молекул. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей. Метод ЛКАО. Приближение невзаимодействующих электронов. Симметризованные ЛКАО. Гибридизация. Построение молекулярных орбиталей. Метод самосогласованного поля.

Свойства силовых постоянных многоатомных молекул. Квантовая теория силовых постоянных.

Элементы симметрии многоатомных молекул. Теория колебательных спектров многоатомных молекул.

Колебательные уровни и систематика перехода. Симметрия колебаний многоатомных молекул.

Физические основы ядерного магнитного резонанса и основные принципы эксперимента ЯМР – уравнение Блоха. Квантомеханическое описание эксперимента ЯМР.

Релаксации и механизмы. Спин-спиновое взаимодействие. Факторы, влияющие на вид спектра ЯМР.

Масс-спектрометрия. Принцип работы и устройство масс-спектрометра. Источники ионов. Масс-анализаторы. Детекторы. Хромато-масс-спектрометрия.

Характеристики масс-спектрометров и масс-спектрометрических детекторов. Применение масс-спектрометрии.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- 1) Знать:
 - а) теоретическую и прикладную квантовую химию;

б) электронную и ядерную магнитную спектроскопии;
в) молекулярную спектроскопию;
г) масс-спектрометрию и рентгеновскую кристаллографию;
д) методику научных исследований с использованием этих физических методов научных исследований.

2) Уметь:

а) ставить цели и задачи научных исследований;
б) выбирать методы необходимые исследований;
в) обрабатывать полученные результаты и анализировать их с учетом литературных данных;
г) представлять проделанную работу в виде отчетов, статей, тезисов и докладов, в которых сформулированы выводы научных исследований.

3) Владеть:

а) современным аппаратом квантово-механических расчетов молекулярных структур;
б) методами определения молекулярных структур, исходя из анализа спектров ЯМР, масс-спектрометрии и РСА.

Зав.кафедрой ХТПНГ



Н.Ю. Башкирцева