

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 4 от 29 мая 2014 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ В МЕТОДЕ ГАЗОВОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ

Краткая аннотация: В результате изучения дисциплины "Теория и эксперимент в методе газовой электронографии" аспиранты должны ознакомиться с теоретическими представлениями и экспериментальными особенностями метода газовой электронографии – уникального дифракционного метода исследования молекулярной структуры и внутренней динамики свободных молекул, конформационного состава вещества; изучить последовательность и содержание этапов определения и уточнения геометрического строения молекул разных типов соединений; получить представление о возможностях современного программного обеспечения, предназначенного для структурного анализа данных по дифракции электронов, дополненных данными квантовой химии, колебательной и вращательной спектроскопии, а также для визуализации результатов структурного исследования.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки, **направленность**: Физическая химия

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)».

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p>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</p>	<p>У1 (УК-1) Уметь анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов</p> <p>В1 (УК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p>
<p>УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки</p>	<p>З1 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности</p> <p>В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований</p>
<p>ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>З2 (ОПК-1) Знать физические принципы, лежащие в основе современных физико-химических методов исследования веществ и материалов, а также возможности, достоинства и ограничения этих методов</p> <p>У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования</p>
<p>ПК-4 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направлению (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия</p>	<p>З2 (ПК-4) Знать место и роль структурных исследований в физической химии</p> <p>У2 (ПК-4) Уметь использовать современное программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ</p>

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 62 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (54 часа занятия лекционного типа, 2 часа групповые консультации, 6 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 46 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Аналитическая геометрия», «Линейная алгебра», «Физика», «Теория вероятности и математическая статистика», «Физическая химия», «Строение молекул», «Квантовая химия», «Физические методы исследования в химии», а также спецкурсы, посвященные исследованию строения и спектров молекул.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы						Самостоятельная работа обучающегося, часы		
		из них						из них		
Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего		
Тема 1. Прямые методы экспери-	32	18		1		1	20	12		12

ментального определения геометрического строения молекул. Основные понятия стационарной квантово-механической теории рассеяния. Рассеяние электронов на атомах. Рассеяние электронов на молекулах.										
Тема 2. Определение геометрических параметров молекул и амплитуд колебаний пар атомов. Физический смысл получаемых параметров. Электронографический анализ нежестких молекул. Учет внутримолекулярных движений большой амплитуды.	32	18		1		1	20	12		12
Тема 3. Совместное использование данных газовой электронографии, колебательной и вращательной спектроскопии, а также результатов квантово-химических расчетов. Метод наименьших квадратов в газовой электронографии. Решение систем нелинейных уравнений	31	18		0		1	19	12		12
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	13					3	3	10		10
Итого	108	54		2		6	62	46		46

8. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций; интерактивные лекции, в ходе которых аспиранты под контролем лектора выполняют задания, способствующие практическому усвоению лекционного материала; лекции-демонстрации проблемного характера, посвященные приемам выполнения различных этапов электронографического исследования. Демонстрации составлены на основе результатов работ, проведенных авторами программы дисциплины. В рамках обсуждаемых тем проводятся демонстрации с использованием современного программного обеспечения и компьютерных баз структурных данных.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Аспиранты также снабжаются инструкциями по работе с программным обеспечением, используемым в электронографических исследованиях. Дополнительные материалы (руководства к выполнению конкретных заданий) размещаются на сайте кафедры физической химии: http://www.chem.msu.ru/rus/chair/phys_w.html

10. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Вилков Л.В., Анашкин М.Г., Засорин Е.З., Мастрюков В.С., Спиридонов В.П., Садова Н.И. Теоретические основы газовой электронографии, Москва: Изд-во Моск. Ун-та, 1974, 227 с.
2. Ищенко А.А., Гиричев Г.В., Тарасов Ю.И. Дифракция электронов: структура и динамика свободных молекул и конденсированного состояния вещества, Москва: Физматлит, 2012, 614 с.
3. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии, Москва: Мир, 2006, 683 с.
4. Цирельсон В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела, Москва: Бинум, 2010, 495 с.

Дополнительная литература

1. Сивин С. Колебания молекул и среднеквадратичные амплитуды. Москва: Мир, 1971, 488 с. Л.А. Асланов Инструментальные методы рентгеноструктурного анализа. М.: Изд-во МГУ, 1983.
2. Vogt N., Rudert R., Rykov A.N., Karasev N.M., Shishkov I.F., Vogt J. Use of imaging plates (IPs) in the gas-phase electron diffraction (GED). Structural Chemistry, 2011, 22(2), 287-291
3. Sipachev V.A. Diffraction measurements and equilibrium parameters. Advances in Physical Chemistry, 2011, ID 864714.

4. Vogt N., Khaikin L.S., Grikina O.E., Rykov A.N., Vogt J. Study of the thymine molecule: equilibrium structure from joint analysis of gas-phase electron diffraction and microwave data and assignment of vibrational spectra using results of ab initio calculations. Journal of Physical Chemistry A, 2008, 112, 7662-7670.

- Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:
- -Компьютерная база данных MOGADOC: <http://www.uni-ulm.de/strudo/mogadoc/>
-База данных NIST <http://www.nist.gov>
-Сайт проекта MolWiki: <http://molwiki.org>
-Сайт проекта UNEX:Unex version 2, 2015 [www http://unexprog.org](http://unexprog.org)
-Сайт проекта GAUSSIAN: gaussian.com

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

Хайкин Леонид Соломонович, д.х.н., в.н.с., комн. Ц-68, тел. (495)939-26-37, e-mail: lskhaikin@phys.chem.msu.ru
Марочкин Илья Иванович, к.х.н., с.н.с., комн. Ц-41, тел. (495)939-40-21, e-mail: imaroch@gmail.com

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
 2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета.
- Образцы контрольных вопросов для текущего контроля усвоения материала:
 1. Перечислите основные этапы развития метода газовой электронографии.
 2. Назовите условия рассеяния пучка электронов молекулой.
 3. Нарисуйте схему эксперимента в методе газовой электронографии.
 4. Опишите условия проведения эксперимента в методе газовой электронографии.

5. Перечислите возможности и ограничения в определении структуры молекул методом газовой электронографии.
6. Что представляет собой функция единичного точечного источника?
7. Назовите результаты электронографических исследований, которые представляют собой важные достижения в области строения молекул.
8. Дайте определение приведенной молекулярной составляющей интенсивности рассеяния.
9. Дайте определение функции радиального распределения и объясните, что она показывает.
10. Объясните геометрическую несогласованность параметров $r_a(r_g)$ - структуры при стандартном варианте анализа.
11. Объясните недостатки r_α -структуры как геометрически согласованной молекулярной модели.
12. Опишите методические особенности электронографического анализа нежестких молекул.
13. Сопоставьте параметры межъядерных расстояний в молекулах, получаемые методами вращательной спектроскопии и газовой электронографии.
14. Сопоставьте геометрические параметры r_{h1} - и r_e -структуры. Что необходимо знать для перехода к равновесным геометрическим параметрам от термически-средних параметров r_g .

• Образцы домашних заданий:

1. Разберитесь вопрос о различии физического смысла для разных типов определяемых из эксперимента геометрических параметров (r_a , r_g , r_α , r_z , r_s , r_e)
2. Что такое вектор плотности тока вероятности для плоской и сферической волн?
3. Как зависит амплитуда колебаний пар атомов от температуры?
4. Изучите работу программы перевода почернений дифракционной картины в интенсивность рассеяния
5. Как метод газовой электронографии использовался для изучения инверсии атомов азота и фосфора в гетероциклических соединениях.
6. Выполните сравнительный анализ методов Ньютона-Рафсона и Ньютона-Гаусса. Отметьте преимущества и недостатки каждого из них.
7. Рассмотрите стандартную выдачу квантово-химической программы GAUSSIAN с расчетом оптимизированных геометрических параметров и силовых полей.
8. При использовании компьютерных баз данных оцените расстояние между соседними атомами углерода в нитробензоле.
9. При использовании компьютерных баз данных оцените расстояние между атомами азота в двух соседних нитрогруппах изолированной молекулы 1,3,5-тринитробензола.
10. Рассмотрите возможности координации атома фосфора и азота в гетероциклах

- Образцы практических контрольных заданий и вопросов для промежуточной аттестации – **зачета**:
 1. Физический смысл разных типов определяемых из эксперимента геометрических параметров.
 2. Особенности совместного структурного анализа данных газовой электронографии и микроволновой спектроскопии.
 3. Полная интенсивность рассеяния, атомное рассеяние, молекулярная составляющая интенсивности рассеяния. Проведение линии фона.
 4. Определите характер зависимости приведенной молекулярной составляющей интенсивности рассеяния от геометрических и динамических параметров, т.е. от межъядерных расстояний и средних амплитуд колебаний пар атомов?
 5. Что такое r_{hl} -структура? Решение структурной ангармонической задачи в первом приближении теории возмущений.
 6. Какое значение имеют результаты квантово-химических расчетов при анализе экспериментальных данных газовой электронографии?
 7. Какие возможности в структурном анализе электронографических данных дает расчет кубических силовых полей методами квантовой химии.
 8. Что Вы знаете об эффекте сокращения Бастиансена-Морино.
 9. Особенности электронографического исследования нежестких молекул. Учет движений большой амплитуды.
 10. В чем отличие статической и динамической моделей в газовой электронографии?
 11. Учет ангармонических поправок при определении равновесной молекулярной структуры.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам, каждый из которых включает теоретические вопросы. На зачете, проводимом в форме индивидуального собеседования, проверяется систематичность представлений о теоретических основах и практическом использовании метода газовой электронографии – уникального метода исследования структуры свободной молекулы; проверяется способность выбора направления экспериментального структурного исследования с учетом представлений о других методах изучения строения молекул. Достижение результатов обучения проверяется при обсуждении принципов работы современной научной аппаратуры, а также возможностей и ограничений физических и математических моделей, используемых для интерпретации электронографических данных. Оценивается знание компьютерных баз структурных данных и возможностей квантово-химических расчетов с помощью современных программных комплексов. По ходу обсуждения отдельных вопросов оценивается осмысленность ответов аспиранта. На каждого аспиранта заполняется ведомость, которая подписывается членом комиссии, принимающим зачет.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Теория и эксперимент в методе газовой электронографии»

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
<i>У1 (УК-1) Уметь</i> анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов	Отсутствие умений	Недостаточное умение анализировать альтернативные варианты электрографического исследования и оценивать потенциальные выигрыши	Владение шаблонами электрографического исследования, достаточное только в рутинных случаях	Довольно полное, но содержащее отдельные пробелы владение приемами электрографического исследования.	Сформированное систематическое владение приемами электрографического исследования	Ответы на конкретные вопросы, поставленные в ходе зачета
<i>В1 (УК-1) Владеть</i> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие владения	Неполное владение отдельными навыками электрографического исследования	Владение шаблонами приемами электрографического исследования, достаточное только в рутинных случаях	Довольно полное, но содержащее отдельные пробелы владение приемами электрографического исследования	Сформированное систематическое владение приемами электрографического исследования	Ответы на конкретные вопросы, поставленные в ходе зачета
31 (УК-2) Знать методы научной исследовательской де-	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о методе элек-	Несистематические знания о методе	Сформированные, но содержащие отдель-	Систематически сформированные знания о	Устный опрос в ходе зачета

ательности		тронографии	электронографии	ные пробелы представления о методе электронографии	методе электронографии	
В2 (УК-2) Владеть технологиями планирования в профессиональной деятельности в сфере научных исследований	Отсутствие владения	Недостаточное владение навыками планирования (только отдельных этапов) электронографического исследования	Посредственное владение построением планов электронографического исследования для рутинных случаев	Довольно успешное, но недостаточно гибкое владение приемами планирования электронографического исследования	Полное владение технологиями гибкого планирования электронографического исследования	Ответы на конкретные вопросы, поставленные в ходе зачета
32 (ОПК-1) Знать физические принципы, лежащие в основе современных физико-химических методов исследования веществ и материалов, а также возможности, достоинства и ограничения этих методов	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о методах определения молекулярной структуры	Несистематические знания о методах определения молекулярной структуры	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах определения молекулярной структуры	Сформированные и систематические знания о методах определения молекулярной структуры	Устный опрос в ходе зачета
У1(ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Недостаточное умение выбирать и применять экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования в элект-	Шаблонное умение выбирать и применять экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования в электронографии	Достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение выбирать и применять экспериментальные и расчетно-теоретические	Сформированное умение выбирать и применять экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования в электр-	Ответы на конкретные вопросы, поставленные в ходе зачета; выполнение домашних заданий

		тронографии		методы исследования в электронографии	нографии	
32 (ПК-4) Знать место и роль структурных исследований в физической химии	Отсутствие знаний	Недостаточные представления о роли структурных исследований в физической химии	Ограниченные представления о роли структурных исследований в физической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о роли и возможностях структурных исследований в физической химии	Сформированные и систематические знания о роли структурных исследований в физической химии	Устный опрос в ходе зачета
У2 (ПК-4) Уметь использовать современное программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ	Отсутствие умений	Недостаточное умение использовать программное обеспечение для расчета структурных параметров в электронографическом исследовании	Недостаточное умение использовать программное обеспечение для расчета структурных параметров в электронографическом исследовании	Достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы, умение использовать программное обеспечение для расчета структурных параметров в электронографическом исследовании	Исчерпывающее умение использовать программное обеспечение для расчета структурных параметров в электронографическом исследовании	Ответы на конкретные вопросы, поставленные в ходе зачета; выполнение домашних заданий