

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением президиума Ученого совета ННГУ

протокол № 1 от 16.01.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Теории и модели химии координационных соединений

Уровень высшего образования
Магистратура

Направление подготовки / специальность
04.04.01 - Химия

Направленность образовательной программы
Физическая химия

Форма обучения
очно-заочная

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина ФТД.01 Теории и модели химии координационных соединений является факультативом в образовательной программе.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-1-н: Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией науках	ПК-1-н-1: Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий ПК-1-н-2: Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	ПК-1-н-1: Знать основные понятия химии координационных соединений, особенности номенклатуры, изомерии, теории химической связи в координационных соединениях. Уметь описывать строение координационных соединений, прогнозировать свойства, а также исследовать закономерности протекания реакций с их участием, Владеть навыками использования основных законов естественнонаучных дисциплин для решения конкретных производственных задач и применения методов математического анализа, теоретического и экспериментального моделирования. ПК-1-н-2: Знать основные направления использования координационных соединений в различных областях человеческой жизни. Уметь использовать полученные знания для изучения других дисциплин химического блока.	Реферат	Зачёт: Контрольные вопросы

		Владеть современными методами физико-химического анализа.		
--	--	---	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очно-заочная
Общая трудоемкость, з.е.	1
Часов по учебному плану	36
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	32
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	0
- КСР	1
самостоятельная работа	3
Промежуточная аттестация	0 Зачёт

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы	Всего	
	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0
Раздел 1. Место фотоэлектронной спектроскопии в ряду спектральных методов исследования координационных соединений.	8	8	0	8	0
Раздел 2. Физические принципы, инструментальное оформление и анализ данных в фотоэлектронной спектроскопии металлокомплексов	10	10	0	10	0
Раздел 3. Современные методы лазерной ионизационной спектроскопии в координационной и металлоорганической химии	6	6	0	6	0
Раздел 4. Квантово-химические расчеты координационных соединений	11	8	0	8	3
Аттестация	0				
КСР	1			1	
Итого	36	32	0	33	3

Содержание разделов и тем дисциплины

Раздел 1. Место фотоэлектронной спектроскопии в ряду спектральных методов исследования координационных соединений.

Сравнение ФЭС с «классическими» спектральными методами. История развития фотоэлектронной спектроскопии. Современные варианты ФЭС: спектроскопия с варьируемой энергией фотонов, анализ углового распределения фотоэлектронов, ФЭС высокого разрешения, ФЭС для решения химических задач.

Раздел 2. Физические принципы, инструментальное оформление и анализ данных в фотоэлектронной спектроскопии металлокомплексов.

Вероятность процесса фотоионизации: сечение ионизации, модель Гелиуса, параметры асимметрии. Инструментальное оформление ФЭС: общая схема спектрометра, вакуумная техника, источники излучения, энергоанализаторы, детекторы, требования к образцам, примеры установок. УФ фотоэлектронная спектроскопия координационных соединений в газовой и конденсированной фазах. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия металлокомплексов. Орбитальные и зарядовые эффекты.

Раздел 3. Современные методы лазерной ионизационной спектроскопии в координационной и металлоорганической химии.

REMPI, ZEKE, MATI спектроскопия: принципы работы, анализ спектров, результаты для сэндвичевых комплексов переходных металлов.

Раздел 4. Квантово-химические расчеты координационных соединений.

Теория функционала плотности и анализ топологии электронной плотности в квантово-химических расчетах координационных соединений.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

1. Абакумов Г.А. Введение в химию координационных соединений : учебное пособие / Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского. - Н. Новгород : ННГУ, 2007. - 168 с

2. Игнатов С.К. Квантовохимическое моделирование атомно-молекулярных процессов : учеб. пособие для студентов ННГУ, обучающихся по направлению подгот. 04.04.01 "Химия" / С. К. Игнатов ; ННГУ. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2019. - 93 с.

3. Игнатов С.К. Задачи по квантовой химии : учебно-методическое пособие / С. К. Игнатов ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2015. - 28 с

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Реферат) для оценки сформированности компетенции ПК-1-н:

1. Современные пакеты квантово-химических программ и программ для анализа топологии электронной плотности: HyperChem
2. Современные пакеты квантово-химических программ и программ для анализа топологии электронной плотности: Gaussian
3. Современные пакеты квантово-химических программ и программ для анализа топологии электронной плотности: PC Gamess
4. Современные пакеты квантово-химических программ и программ для анализа топологии электронной плотности: AIMAll
5. Современные пакеты квантово-химических программ и программ для анализа топологии электронной плотности: Multiwfn

Критерии оценивания (оценочное средство - Реферат)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Реферат, презентация написаны в соответствии с предъявляемыми требованиями, продемонстрирован творческий подход, тема раскрыта полностью. Защита показала владение информацией по теме реферата в полном объеме. Получены исчерпывающие ответы на дополнительные вопросы.
отлично	Реферат, презентация написаны в соответствии с предъявляемыми требованиями, основные разделы по теме реферата раскрыты. Защита показала владение информацией по теме реферата. Получены ответы на дополнительные вопросы с несущественным недочетами.
очень хорошо	Реферат, презентация написаны в соответствии с предъявляемыми требованиями, основные разделы по теме реферата раскрыты, но имеется несколько несущественных ошибок. Защита показала владение информацией по теме реферата. Получены ответы на дополнительные вопросы с недочетами.
хорошо	Реферат, презентация написаны в соответствии с основными требованиями, тема реферата раскрыта с некоторыми недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при защите реферата с некоторыми недочетами. Даны неполные ответы на дополнительные вопросы.
удовлетворительно	Реферат, презентация написаны с существенными отклонениями от предъявляемых требований, тема реферата раскрыта частично. соответствии с основными требованиями, тема реферата раскрыта с некоторыми недочетами. Допущено много негрубых ошибок при защите реферата и при ответе на дополнительные вопросы.

Оценка	Критерии оценивания
неудовлетворительно	При написании реферата и презентации не выполнены предъявляемые требования, тема реферата не раскрыта. Защита показала отсутствие понимания материала. Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. Не получены ответы на дополнительные вопросы.
плохо	Содержание реферата, презентации не соответствует теме, предъявляемые требования не соблюдены. Отсутствие знаний теоретического материала. Отсутствие владения материалом при защите реферата. Отказ обучающегося от ответа на дополнительные вопросы. Или реферат не предоставлен.

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено			зачтено			
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов

						объеме	
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторым и недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторым и недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-1-н

1. История развития метода фотоэлектронной спектроскопии.
2. Классические и современные варианты ФЭС.
3. УФ фотоэлектронная спектроскопия координационных соединений в газовой и конденсированной фазах.

4. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия металлокомплексов. Орбитальные и зарядовые эффекты.
5. Современные методы лазерной ионизационной спектроскопии в исследовании строения координационных соединений.
6. Инструментальное оформление в методах фотоэлектронной и фотоионизационной спектроскопии. Источники излучения, энергоанализаторы, детекторы.
7. Методы квантово-химических расчетов в изучении строения координационных соединений.
8. Современные пакеты программ для квантово-химических расчетов молекул металлокомплексов и визуализации расчетных данных.

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Допустимый уровень знаний выше минимального. Продемонстрированы основные умения. При решении типовых заданий могут быть негрубые ошибки. Имеется набор навыков выше минимального для решения стандартных задач с некоторыми недочетами.
не зачтено	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения и базовые навыки. Или невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Мазалов Лев Николаевич. Рентгеновские спектры и химическая связь / АН СССР, Сиб. отд-ние. - Новосибирск : Наука, Сиб. отд-ние, 1982. - 111 с. : ил. - (Научно-популярная серия). - 0.20., 2 экз.
2. Мазалов Лев Николаевич. Рентгеновская и рентгеноэлектронная спектроскопия молекул : (Теоретические основы) : учеб. пособия / Новосиб. гос. ун-т им. Ленинского комсомола. - Новосибирск : НГУ, 1979. - 92 с. : ил. - 0.28., 2 экз.
3. Бейдер Р. Атомы в молекулах: квантовая теория = Atoms in Molecules: A Quantum Theory / пер. с англ. Е. С. Апостоловой [и др.] ; под ред. М. Ю. Антипина, В. Г. Цирельсона. - М. : Мир, 2001. - 532 с. - (Теоретические основы химии). - ISBN 5-03-003363-7 : 234.44., 1 экз.
4. Ищенко А. А. Методы анализа поверхности. Ч. 2. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия / Ищенко А. А., Лазов М. А. - Москва : РТУ МИРЭА, 2022. - 58 с. - Книга из коллекции РТУ МИРЭА - Химия., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=807354&idb=0>.
5. Бейкер А. Фотоэлектронная спектроскопия / пер. с англ. М. М. Каханы ; под ред. В. С. Урусова. - М. : Мир, 1975. - 200 с. - 0.94., 2 экз.
6. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия : [материалы симпоз. 3-8 июня 1975 г.] / АН УССР, Ин-т металлофизики ; [редкол.: В. В. Немошкленко (отв. ред.) и др.]. - Киев : Наукова

думка, 1977. - 183 с. : граф. - 1.30., 1 экз.

Дополнительная литература:

1. Костромина Нина Анатольевна. Химия координационных соединений : [учеб. пособие для хим. и хим.-технол. специальностей вузов]. - М. : Высшая школа, 1990. - 431, [1] с. : ил. - ISBN 5-06-001020-1 (в пер.) : 1.30., 2 экз.
2. Скопенко Виктор Васильевич. Координационная химия : [для хим. фак. ун-тов]. - Киев : Вища школа, 1984. - 232 с. : граф. - (Практикум). - 0.65., 1 экз.
3. Киселев Ю. М. Химия координационных соединений : учебник и практикум / Ю. М. Киселев. - 2-е изд. - Москва : Юрайт, 2023. - 747 с. - (Высшее образование). - ISBN 978-5-534-13812-2. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=847492&idb=0>.
4. Киселев Юрий Михайлович. Химия координационных соединений : Учебник и практикум Для бакалавриата и магистратуры / Киселев Ю. М. - Москва : Юрайт, 2016. - 657 с. - (Бакалавр и магистр. Академический курс). - ISBN 978-5-9916-4164-7. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=762297&idb=0>.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

Пакеты программ Gaussian03, PC Gamess, ChemCraft, AIMAll, Multiwfn; сайты Американского химического общества (www.pubs.acs.org) и Королевского химического общества (www.rsc.org).

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по направлению подготовки/специальности 04.04.01 - Химия.

Автор(ы): Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук, профессор.

Заведующий кафедрой: Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 28.09.2023 г, протокол № 1.