

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 ученого совета ННГУ
протокол от
«16» июня 2021 г. № 8

**Рабочая программа дисциплины
ВВЕДЕНИЕ В ХИМИЮ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ**

Уровень высшего образования

Бакалавриат

Направление подготовки / специальность

04.03.01 – Химия

Направленность образовательной программы

Химия и материаловедение

Форма обучения

Очная, очно-заочная

Нижний Новгород
2021 год

Лист актуализации

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

04 июня 2021 г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021-2022 учебном году на заседании кафедры физической химии.

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2022-2023 учебном году на заседании кафедры

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2023-2024 учебном году на заседании кафедры

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2024-2025 учебном году на заседании кафедры

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Введение в химию высоких энергий» относится к вариативной части Блока 1 ОПОП по направлению подготовки 04.03.01 – Химия (Б1.В.03.ДВ.01.07), является обязательной для освоения студентами очной и очно-заочной форм обучения, специализирующимися по кафедре физической химии, на четвертом году в 7 семестре и на пятом году в 9 семестре соответственно.

Для освоения дисциплины «Введение в химию высоких энергий» обучающиеся используют знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе изучения базовых дисциплин: «Высшая математика», «Общая физика», «Квантовая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Высокомолекулярные соединения»

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

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**	
ПК-1-н Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1-н-1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР.	<i>Уметь:</i> выбирать методы исследования в химии высоких энергий; использовать методы расчета молекул в возбужденных состояниях методами современной квантовой химии; оценивать результаты исследований с точки зрения применений химии высоких энергий в других областях химии и химической технологии; планировать научно-исследовательские исследования в химии высоких энергий <i>Знать:</i> основные концепции современной химии высоких энергий: механизмы взаимодействия высокоэнергетических излучений с веществом; величины, характеризующие высокоэнергетическое	ФОС «Введение в химию высоких энергий»
	ПК-1-н-2 Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИР.		
	ПК-1-н-3. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.		
	ПК-1-н-4. Готовит объекты исследования.		

		<p>излучение и его взаимодействие с веществом; основные законы фотохимии; фотофизические методы дезактивации (перехода в основное состояние) возбужденных состояний молекул; особенности применения методов поверхностей потенциальной энергии в химии высоких энергий; принципы построения поверхностей потенциальной энергии молекул в различных электронных состояниях; механизмы реакций разложения веществ под действием высокоэнергетического излучения; механизмы реакций с участием молекул в возбужденных состояниях</p> <p><i>Владеть приемами работы на компьютерах с современными программными комплексами, позволяющими рассчитывать свойства молекул в возбужденных состояниях; приемами работы со спектральными приборами в области химии высоких энергий; приемами расшифровки спектров поглощения и испускания</i></p>	
<p>ПК-2-н Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы</p>	<p>ПК-2-н-1. Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных).</p>	<p><i>Уметь осуществлять поиск химической информации о свойствах молекул в возбужденных состояниях и их реакциях, встречающихся в химии высоких энергий; систематизировать и анализировать информацию о химии</i></p>	<p>ФОС «Введение в химию высоких энергий»</p>

		<p>высоких энергий; использовать специализированные базы знаний и базы данных в области химии высоких энергий</p> <p><i>Знать</i> об особенностях химической информации в области химии высоких энергий; какие информационные (сетевые) ресурсы существуют в фотохимии, спектроскопии и плазмохимии, фотолитографии</p> <p><i>Владеть</i> приемами работы в информационных сетях по поиску новой химической информации в области химии высоких энергий; приемами организации собственных хранилищ химической информации в области химии высоких энергий; приемами анализа результатов информационного поиска в химии высоких энергий</p>	
<p>ПК-3-н. Способен осуществлять контроль качества веществ и материалов</p>	<p>ПК-3-н-1. Выполняет стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для характеристики веществ и материалов.</p> <p>ПК-3-н-2. Составляет отчеты о выполненной работе по заданной форме.</p>	<p><i>Уметь</i> проводить оценку результатов НИР в химии высоких энергий, с целью выявления возможности их практического применения; проводить сравнение полученных результатов НИР с литературными данными; использовать результаты НИР в химии высоких энергий в микролитографическом изготовлении изделий микроэлектроники, микрофлюидики, модификации</p>	<p>ФОС «Введение в химию высоких энергий»</p>

		<p>поверхностей, утилизации отходов производства, контроля окружающей среды; уметь определять дальнейшее направление исследований с учетом полученных в ходе НИР результатов.</p> <p><i>Знать</i> способы оценки результатов НИР в области химии высоких энергий; способы компьютерного поиска результатов исследования возбужденных состояний в научно-технической и патентной литературе и информационных сетях; требования к оформлению результатов исследования в химии высоких энергий; способы изменений направлений исследований в химии высоких энергий в зависимости от полученных результатов; способы вычленения из результатов исследований в химии высоких энергий для практического использования; способы патентования результатов НИР в химии высоких энергий.</p> <p><i>Владеть</i> основами компьютерного поиска результатов исследования возбужденных состояний в научно-исследовательской и патентной литературе и информационных сетях; способами реализации результатов исследования в химии</p>	
--	--	--	--

		высоких энергий в виде научных статей, выступлений на конференциях и патентов.	
<p>ПК-1-т.</p> <p>Способен выбирать технические средства и методы испытаний для решения технологических задач, поставленных специалистом более высокой квалификации</p>	<p>ПК-1-т-1.</p> <p>Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИОКР</p> <p>ПК-1-т-2.</p> <p>Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИОКР</p> <p>ПК-1-т-3.</p> <p>Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИОКР</p>	<p><i>Знать</i> об использовании методов исследования в химии высоких энергий для совершенствования материалов и технологии изготовления микроэлектроники, проведения синтезов с использованием микрофлюидных технологий, получения приборов для диагностики в области медицины; о материалах для микролитографии (фото-, рентгеновской, электронной и ионной); о способах моделирования технологических процессов на основе химии высоких энергий; о принципах планирования прикладных НИР на основе результатов исследований методами химии высоких энергий</p> <p><i>Уметь</i> использовать результаты исследований в химии высоких энергий для поиска новых технологий и материалов; использовать методы химии высоких энергий для прогноза характеристик и свойств новых технологий и материалов; разрабатывать новые медицинские приборы с использованием методов микрофлюидики и плазмохимической обработки материалов</p> <p><i>Владеть</i> приемами</p>	<p>ФОС «Введение в химию высоких энергий»</p>

		деятельности по поиску прикладных решений на основе результатов, полученных в химии высоких энергий; основами изготовления приборов для микрофлюидных технологий; основами плазмохимической обработки материалов.	
--	--	---	--

Окончательное завершение формирования компетенций, предусмотренных в рамках данной дисциплины, происходит при прохождении производственных практик и выполнения ВКР.

3. Структура и содержание дисциплины «Введение в химию высоких энергий»

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная форма обучения	очно-заочная форма обучения
Общая трудоемкость	10 ЗЕТ	10 ЗЕТ
Часов по учебному плану	360	360
в том числе		
аудиторные занятия (контактная работа):		
- занятия лекционного типа	64	64
- занятия семинарского типа	64	32
-занятия лабораторного типа	96	32
-КСИРФ	2	2
самостоятельная работа	98	194
Промежуточная аттестация – экзамен	36	36

3.2. Структура дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)			в том числе														
				Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы											Самостоятельная работа обучающегося, часы			
				из них														
	Очная	Очно-заочная	Заочная	Занятия лекционного типа			Занятия семинарского типа			Занятия лабораторного типа			Всего		Очная	Очно-заочная	Заочная	
Очная				Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная				
Тема 1. Предмет химии высоких энергий.	7	10		4	4		—	—		—	—		4	4		3	6	
Тема 2. Классификация процессов химии высоких энергий. Первичные и вторичные процессы в химии высоких энергий.	11	12		4	4		4	2		—	—		8	6		3	6	
Тема 3. Генерирование возбужденных состояний под действием света	11	12		4	4		4	2		—	—		8	6		3	6	
Тема 4. Фотофизические процессы распада возбужденных состояний.	27	16		4	4		4	2		16	4		24	10		3	6	
Тема 5. Метод поверхностей потенциальной энергии как основа теоретического исследования реакций химии высоких энергий.	44	56		12	12		12	6					24	18		20	38	
Тема 6. Реакции изомеризации и	32	25		4	4		6	3		16	6		26	13		6	12	

перегруппировки																	
Тема 7. Реакция замещения с участием возбужденных состояний.	32	25		4	4		6	3		16	6		26	13		6	12
Тема 8. Перенос атомов в химии высоких энергий.	14	18		4	4		4	2		–	–		8	6		6	12
Тема 9. Окислительно-восстановительные реакции в химии высоких энергий.	32	25		4	4		6	3		16	6		26	13		6	12
Тема 10. Реакции фотохимического присоединения и фотополимеризации.	32	25		4	4		6	3		16	6		26	13		6	12
Тема 11. Роль радикальных и бирадикальных частиц в химии высоких энергий.	16	19		4	4		6	3		–	–		10	7		6	12
Тема 12. Литография как раздел химии высоких энергий.	56	65		10	10		6	3		16	4		32	17		24	48
Тема 13. Перспективные направления химии высоких энергий.	8	14		2	2		–	–		–	–		2	2		6	12
Контроль самостоятельной работы	2	2															
Промежуточная аттестация – экзамен	36	36															
Итого				64	64		64	32		96	32		224	128		98	194

Промежуточный контроль осуществляется при проведении экзамена.

3.3. Содержание разделов дисциплины

Тема 1. Предмет химии высоких энергий.

Общая характеристика фотохимии, радиационной химии и плазмохимии. Химия высоких энергий в современном мире. История возникновения и становления Химии высоких энергий. Особенности методологии и химии высоких энергий, ее тесная связь с квантовой химией и квантовой механикой.

Тема 2. Классификация процессов химии высоких энергий. Первичные и вторичные процессы в химии высоких энергий.

Фотофизические и фотохимические процессы. Поглощение и испускание высокоэнергетического излучения. Основные понятия фотометрии. Закон Бугера-Ламберта-Бера в интегральной и дифференциальной форме. Границы применимости этого закона. Понятие о сечении захвата излучения.

Основные законы фотохимии. Закон Гроткуса-Дрепера. Закон Штарка-Эйнштейна. Закон Бунзена-Роско. Понятие о квантовом выходе процесса в химии высоких энергий. Методологическое значение закона Эйнштейна. Основы формальной фотохимической кинетики. Решение уравнений для систем с ограниченной подвижностью реагентов. Уравнения Дилла в моделировании процессов фотолитографии.

Тема 3. Генерирование возбужденных состояний под действием света.

Понятие о теории излучения Эйнштейна. Нестационарная теория возмущений как методологическая основа для описания взаимодействия света с веществом. Понятие о дипольном моменте электронного перехода. Коэффициенты Эйнштейна A и B . Эффект вынужденного излучения. Лазеры. Квантово-механическая теория правил отбора электронных переходов. Правило запрета по мультиплетности. Синглет-синглетные, триплет-триплетные и синглет-триплетные переходы. Эффект тяжелого атома.

Номенклатура Каша возбужденных состояний. (σ, σ^*) -, (π, π^*) -, (n, σ^*) - и (n, π^*) -возбужденные состояния. Возбужденные состояния с переносом заряда. Экситоны как возбужденные состояния. Ридберговы возбужденные состояния.

Физические свойства молекул в возбужденных состояниях. Принцип Франка-Кондона и его нарушение. Распределение электронной плотности в молекулах, находящихся в возбужденных состояниях. Кислотно-основные свойства в возбужденных состояниях.

Тема 4. Фотофизические процессы распада возбужденных состояний.

Диаграмма Яблонского. Временные характеристики основных физических процессов распада возбужденных состояний молекул. Испускание света атомами и молекулами. Флуоресценция и фосфоресценция. Уравнения Штерна-Фольмера. Применение флуоресценции и фосфоресценции в химии высоких энергий, химии, биологии, аналитической химии и медицинской химии.

Безызлучательные процессы дезактивации возбужденных состояний. Внутренняя конверсия, колебательная релаксация интеркомбинационная конверсия. Перенос энергии возбуждения. Фотосенсибилизация. Метод фотосенсибилизации для определения энергий в возбужденных состояниях.

Тема 5. Метод поверхностей потенциальной энергии как основа теоретического исследования реакций химии высоких энергий.

Принцип Борна-Оппенгеймера. Концепция поверхностей потенциальной энергии как методологическая основа химии высоких энергий. Роль квантовой химии в построении поверхностей потенциальной энергии.

Классификация точек на поверхности потенциальной энергии. Область исходных веществ, область переходного состояния, область продуктов реакции. Понятие о реакционном пути. Неоднозначность с определением пути реакции. Адиабатические и неадиабатические процессы в химии высоких энергий.

Описание диссоциативных процессов при помощи метода поверхностей потенциальной энергии. Проблема выбора метода расчета поверхностей потенциальной энергии. Механизм термического действия света. Механизм оптической диссоциации. Механизм диссоциации в диссоциативном возбужденном состоянии. Механизм преддиссоциации. Фотоионизация. Особенности фотохимической диссоциации в конденсированных средах. Правила корреляции при фотохимической диссоциации.

Диссоциация в (σ, σ^*) - возбужденном состоянии. Фотохимия насыщенных углеводородов. Диссоциация в (π, π^*) -возбужденном состоянии. Фотохимия олефинов.

Диссоциация в (n, σ^*) - возбужденном состоянии. Фотохимические реакции галоген-содержащих соединений. Роль неподеленной электронной пары гетероатома. Фотохимические реакции азот-содержащих соединений. Фотохимическая диссоциация кислород-содержащих соединений. Фотохимическая диссоциация серусодержащих соединений.

Диссоциация в (n, π^*) -возбужденном состоянии. Роль неподеленной электронной пары гетероатома. Фотохимические реакции в альдегидах и кетонах. Механизм распада по Норришу I и II. Фотохимические реакции азот-содержащих соединений. Фотохимический распад орто-нафтохинондиазидов – основы позитивных фоторезистов.

Тема 6. Реакции изомеризации и перегруппировки.

Механизмы реакций изомеризации и перегруппировок с точки зрения поверхностей потенциальной энергии. Классификация по механизму реакционного акта. Цис-транс-изомеризация в возбужденных состояниях. Твердофазные реакции цис-транс-изомеризации. Использование систем, способных к цис-транс-изомеризации в качестве структурных зондов. Циклизация возбужденных состояний. Реакция Циммермана. Реакция циклизации по Янгу. Валентная изомеризация. Внутримолекулярный перенос атомов. Фототаутомерия. Расщепление молекулы на радикалы и их последующая рекомбинация без выхода в реакционный объем. Явление фотохромизма.

Тема 7. Реакция замещения с участием возбужденных состояний.

Классификация механизмов замещения в химии высоких энергий. Фотоиндуцированное радикальное замещение. Цепное радикальное фотохимическое замещение. Фотохимическое радикальное внутримолекулярное замещение. Гетеролитическое фотохимическое замещение в ароматических соединениях. Фотохимическое замещение в комплексных соединениях металлов.

Тема 8. Перенос атомов в химии высоких энергий.

Внутримолекулярный и межмолекулярный перенос атома водорода молекулами в (n, π^*) -возбужденных состояниях. Роль триплетного состояния. Отрыв атома водорода возбужденными молекулами в состояниях (π, π^*) - типа. Роль отрыва атома водорода радикальными частицами. Механизмы процессов переноса атомов водорода. Одностадийный перенос атома водорода. Перенос электрона, сопряженный с переносом протона. Туннельный перенос атомов водорода. Роль переноса атома водорода в инициировании радикальной полимеризации.

Тема 9. Окислительно-восстановительные реакции в химии высоких энергий.

Электронный перенос как стадия окислительно-восстановительных реакций. Теория Маркуса. Фотохимическое восстановление химических соединений. Фотохимическое окисление органических соединений. Фотохимическое окисление органических соединений с участием синглетного кислорода. Фотохимическое окисление с участием неорганических оксидов. Плазмохимическое окисление как способ синтеза новых соединений и модификации поверхностей материалов.

Тема 10. Реакции фотохимического присоединения и фотополимеризации.

Классификация реакций фотоприсоединения. Присоединение типа $\pi+\sigma$. Присоединение типа $\pi+\pi$ (циклоприсоединение). Фотохимическое присоединение в твердом состоянии. Правило Шмидта. Хиральность реакций фотохимического присоединения. Плазмохимические реакции присоединения. Плазмохимический синтез полимерных пленок – путь к получению электронных резистов нового поколения. Плазмохимический синтез халькогенидных стекол.

Тема 11. Роль радикальных и бирадикальных частиц в химии высоких энергий.

Общая характеристика химических реакций, типичных для радикалов. Реакции рекомбинации. Реакции диспропорционирования. Реакция элиминирования малых молекул радикалами. Механизмы образования изображения в электронных резистах на основе полимерных пленок. Электронная литография как важнейшее применение химии высоких энергий. Реакция переноса атома. Присоединение радикальных частиц. Реакция одноэлектронного переноса. Реакции перегруппировок радикалов. Радикальные пары и их роль в фотохимии. Роль бирадикальных частиц в химии высоких энергий.

Тема 12. Литография как раздел химии высоких энергий.

Основные стадии литографического процесса. Резисты и их функциональные свойства. Чувствительность резиста к действию высокоэнергетического излучения. Разрешающая способность. Контраст фоторезиста. Стойкость к химическому и плазмохимическому травлению. Адгезия резистов. Увеличение-уменьшение адгезии резистов при помощи плазмохимических обработок. Механизмы формирования изображения в позитивных фоторезистах. Механизмы формирования изображения в негативных фоторезистах. Механизм формирования резистного изображения в электронных резистах. Характеристика современной литографии как основной стадии микроэлектронной технологии.

Тема 13. Перспективные направления химии высоких энергий.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студентов включает работу в читальном зале библиотеки, в учебных кабинетах (лабораториях) и в домашних условиях, с доступом к ресурсам Интернет для подготовки к устному опросу.

К форме текущего контроля успеваемости дисциплины относится **экзамен**.

5. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю), включающий

5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Промежуточный контроль качества усвоения студентами содержания дисциплины проводится в виде комплексного экзамена, на котором определяются:

- уровень усвоения студентами основного учебного материала по дисциплине;
- уровень понимания студентами изученного материала;
- способности студентов использовать полученные знания для решения конкретных задач

Для проведения промежуточного контроля сформированности компетенции используется: ответ по билету на экзамене.

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	Шкала оценивания сформированности 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, без ошибок.	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 несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения,. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом. 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 некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения.

5.2.1 Контрольные вопросы

<i>Вопросы</i>	<i>Код формируемой компетенции</i>
1. Предмет химии высоких энергий. Общая характеристика фотохимии, радиационной химии и плазмохимии.	ПК-1-н, ПК-2-н, ПК-3-н, ПК-1-т
2. Что такое первичные и вторичные процессы в химии высоких энергий?	ПК-1-н, ПК-2-н
3. Опишите поглощение и испускание высокоэнергетического излучения	ПК-2-н
4. Сформулируйте закон Бугера-Ламберта-Бера в интегральной и дифференциальной форме. Назовите границы применимости этого закона.	ПК-2-н
5. Что такое сечение захвата излучения в химии высоких энергий	ПК-1-н, ПК-2-н, ПК-1-т
6. Сформулируйте закон Гроткуса-Дрепера. Опишите его методологическую роль в химии высоких энергий.	ПК-2-н
7. Дайте определение квантового выхода в химии высоких энергий. Покажите, как он может применяться в фотохимии.	ПК-2-н
8. Сформулируйте закон Штарка-Эйнштейна. В чем состоит его значение для современной фотохимии.	ПК-2-н
9. Сформулируйте закон Бунзена-Роско.	ПК-2-н
10. Методологическое значение закона Эйнштейна.	ПК-2-н
11. Основы формальной фотохимической кинетики.	ПК-1-н, ПК-2-н
12. Решение уравнений фотохимической кинетики для систем с ограниченной подвижностью реагентов.	ПК-3-н, ПК-1-т
13. Уравнения Дилла в моделировании процессов фотолитографии.	ПК-1-т
14. Фотофизические процессы распада возбужденных состояний в химии высоких энергий.	ПК-2-н, ПК-3-н
15. Диаграмма Яблонского. Временные характеристики основных физических процессов распада возбужденных состояний молекул.	ПК-2-н
16. Испускание света атомами и молекулами. Флуоресценция и фосфоресценция.	ПК-1-н, ПК-2-н, ПК-3-н
17. Уравнения Штерна-Фольмера.	ПК-2-н, ПК-3-н
18. Применение флуоресценции и фосфоресценции в химии высоких энергий, химии, биологии, аналитической химии и медицинской химии.	ПК-1-н, ПК-1-т
19. Безызлучательные процессы дезактивации возбужденных состояний. Внутренняя конверсия, колебательная релаксация интеркомбинационная конверсия.	ПК-2-н
20. Перенос энергии возбуждения. Фотосенсибилизация. Метод фотосенсибилизации для определения энергий в возбужденных состояниях.	ПК-2-н, ПК-3-н
21. Понятие о теории излучения Эйнштейна.	ПК-2-н
22. Нестационарная теория возмущений как методологическая основа для описания взаимодействия света с веществом.	ПК-2-н
23. Понятие о дипольном моменте электронного перехода. Коэффициенты Эйнштейна А и В.	ПК-2-н
24. Эффект вынужденного излучения. Лазеры.	ПК-2-н, ПК-1-т, ПК-3-н

25. Квантово-механическая теория правил отбора электронных переходов.	ПК-2-н
26. Правило запрета по мультиплетности. Синглет-синглетные, триплет-триплетные и синглет-триплетные переходы. Эффект тяжелого атома.	ПК-2-н, ПК-3-н
27. Номенклатура Каша возбужденных состояний. (σ, σ^*) -, (π, π^*) -, (n, σ^*) - и (n, π^*) - возбужденные состояния.	ПК-2-н
28. Возбужденные состояния с переносом заряда.	ПК-1-н, ПК-2-н, ПК-3-н
29. Экситоны как возбужденные состояния. Ридберговы возбужденные состояния.	ПК-2-н
30. Принцип Франка-Кондона и его нарушение.	ПК-2-н
31. Распределение электронной плотности в молекулах, находящихся в возбужденных состояниях. Кислотно-основные свойства в возбужденных состояниях.	ПК-2-н
32. Принцип Борна-Оппенгеймера. Концепция поверхностей потенциальной энергии как методологическая основа химии высоких энергий.	ПК-2-н, ПК-3-н
33. Классификация точек на поверхности потенциальной энергии. Область исходных веществ, область переходного состояния, область продуктов реакции. Понятие о реакционном пути. Неоднозначность с определением пути реакции.	ПК-2-н
34. Адиабатические и неадиабатические процессы в химии высоких энергий.	ПК-2-н
35. Описание диссоциативных процессов при помощи метода поверхностей потенциальной энергии. Проблема выбора метода расчета поверхностей потенциальной энергии.	ПК-2-н
36. Механизмы химической диссоциации в возбужденных состояниях. Механизм термического действия света. Механизм оптической диссоциации. Механизм диссоциации в диссоциативном возбужденном состоянии. Механизм преддиссоциации. Фотоионизация.	ПК-1-н, ПК-2-н
37. Особенности фотохимической диссоциации в конденсированных средах. Фотография	ПК-1-т, ПК-1-н, ПК-2-н
38. Правила корреляции при фотохимической диссоциации.	ПК-2-н
39. Диссоциация в (σ, σ^*) - возбужденном состоянии. Фотохимия насыщенных углеводородов.	ПК-2-н
40. Диссоциация в (π, π^*) -возбужденном состоянии. Фотохимия олефинов.	ПК-2-н
41. Диссоциация в (n, σ^*) - возбужденном состоянии. Фотохимические реакции галоген-содержащих соединений. Роль неподеленной электронной пары гетероатома. Фотохимические реакции азотсодержащих соединений. Фотохимическая диссоциация кислородсодержащих соединений. Фотохимическая диссоциация серусодержащих соединений.	ПК-2-н, ПК-3-н
42. Диссоциация в (n, π^*) -возбужденном состоянии. Роль неподеленной электронной пары гетероатома. Фотохимические реакции в альдегидах и кетонах. Механизм распада по Норришу I и II. Фотохимические реакции азотсодержащих соединений.	ПК-1-т, ПК-2-н
43. Фотохимический распад орто-нафтохинондиазидов – основы позитивных фоторезистов.	ПК-1-т, ПК-2-н
44. Механизмы реакций изомеризации и перегруппировок молекул в возбужденных состояниях с точки зрения поверхностей	ПК-2-н, ПК-3-н

потенциальной энергии. Классификация по механизму реакционного акта.	
45. Цис-транс-изомеризация в возбужденных состояниях.	ПК-3-н
46. Твердофазные реакции цис-транс-изомеризации. Использование систем, способных к цис-транс-изомеризации в качестве структурных зондов.	ПК-3-н, ПК-1-т
47. Циклизация возбужденных состояний. Реакция Циммермана. Реакция циклизации по Янгу.	ПК-2-н
48. Реакция валентная изомеризация молекул в возбужденных состояниях.	ПК-1-н, ПК-2-н, ПК-3-н
49. Внутримолекулярный перенос атомов. Фототаутомерия.	ПК-2-н
50. Расщепление молекулы на радикалы и их последующая рекомбинация без выхода в реакционный объем.	ПК-2-н
51. Явление фотохромизма.	ПК-1-н, ПК-1-т, ПК-2-н, ПК-3-н
52. Реакция замещения с участием возбужденных состояний. Классификация механизмов замещения в химии высоких энергий.	ПК-1-н, ПК-2-н
53. Фотоиндуцированное радикальное замещение. Цепное радикальное фотохимическое замещение. Фотохимическое радикальное внутримолекулярное замещение.	ПК-2-н
54. Гетеролитическое фотохимическое замещение в ароматических соединениях.	ПК-2-н
55. Фотохимическое замещение в комплексных соединениях металлов.	ПК-1-н, ПК-2-н, ПК-3-н
56. Внутримолекулярный и межмолекулярный перенос атома водорода молекулами в (n, π^*)- возбужденных состояниях. Роль триплетного состояния. Отрыв атома водорода возбужденными молекулами в состояниях (π, π^*)- типа.	ПК-2-н
57. Роль отрыва атома водорода радикальными частицами в химии высоких энергий.	ПК-2-н, ПК-3-н
58. Механизмы процессов переноса атомов водорода. Одностадийный перенос атома водорода. Перенос электрона, сопряженный с переносом протона. Туннельный перенос атомов водорода.	ПК-2-н
59. Роль переноса атома водорода в инициировании радикальной полимеризации.	ПК-2-н, ПК-3-н
60. Роль окислительно-восстановительных реакций в химии высоких энергий.	ПК-1-н, ПК-2-н, ПК-3-н
61. Электронный перенос как стадия окислительно-восстановительных реакций. Теория Маркуса.	ПК-2-н
62. Фотохимическое восстановление химических соединений.	ПК-2-н
63. Фотохимическое окисление органических соединений. Фотохимическое окисление органических соединений с участием синглетного кислорода.	ПК-2-н, ПК-3-н, ПК-1-т
64. Фотохимическое окисление с участием неорганических оксидов.	ПК-1-т, ПК-1-н, ПК-2-н
65. Плазмохимическое окисление как способ синтеза новых соединений и модификации поверхностей материалов.	ПК-1-н, ПК-2-н
66. Классификация реакций фотоприсоединения. Присоединение типа $\pi + \sigma$. Присоединение типа $\pi + \pi$ (циклоприсоединение).	ПК-2-н
67. Фотохимическое присоединение в твердом состоянии. Правило Шмидта.	ПК-2-н

68. Плазмохимические реакции присоединения.	ПК-2-н, ПК-3-н
69. Плазмохимический синтез полимерных пленок – путь к получению электронных резистов нового поколения. Плазмохимический синтез халькогенидных стекол.	ПК-1-т, ПК-1-н, ПК-2-н
70. Общая характеристика химических реакций, типичных для радикалов в химии высоких энергий. Реакции рекомбинации. Реакции диспропорционирования. Реакция элиминирования малых молекул радикалами.	ПК-2-н
71. Механизмы образования изображения в электронных резистах на основе полимерных пленок. Электронная литография как важнейшее применение химии высоких энергий.	ПК-1-т, ПК-2-н
72. Литография как раздел химии высоких энергий.	ПК-1-т
73. Основные стадии литографического процесса	ПК-1-т
74. Резисты и их функциональные свойства. Чувствительность резиста к действию высокоэнергетического излучения. Разрешающая способность. Контраст фоторезиста. Стойкость к химическому и плазмохимическому травлению. Адгезия резистов.	ПК-1-т
75. Увеличение-уменьшение адгезии резистов при помощи плазмохимических обработок.	ПК-1-т
75. Механизмы формирования изображения в позитивных фоторезистах.	ПК-1-т
76. Механизмы формирования изображения в негативных фоторезистах.	ПК-1-т
77. Механизм формирования резистного изображения в электронных резистах.	ПК-1-т
78. Характеристика современной литографии как основной стадии микроэлектронной технологии.	ПК-1-н, ПК-1-т

5.2.2. Типовые тестовые задания для оценки сформированности компетенции ПК-1-н.

Задание 1. Опишите научные основы плазмохимического получения неорганических материалов.

Задание 2. Опишите механизмы фотоокисления при облучении кристаллических оксидов.

Задание 3. Опишите механизмы, лежащие в основе применения халькогенидных пленок в качестве фоторезистов.

Задание 4. Опишите механизмы образования изображения в галогенсеребрянных материалах.

5.2.3. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ПК-2-н

Задание 1. Опишите физико-химические основы получения изображения в позитивных фоторезистах.

Задание 2. Опишите физико-химические основы получения изображения в негативных фоторезистах.

Задание 3. Опишите механизмы отрыва атома водорода возбужденными молекулами.

Задание 4. Опишите методы фотостабилизации полимерных материалов.

Задание 5. Опишите формализм фотохимической кинетики с использованием дифференциальной формы закона Бугера-Ламберта-Бера в приближении ограниченной подвижности реагентов.

Задание 6. В чем состоит значение квантово-химических исследований для плазмохимии.

Задание 7. В чем состоит значение квантовой химии в фотохимии.

Задание 8. Опишите стратегию поиска переходных состояний в химии высоких энергий при помощи методов квантовой химии.

5.2.4. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ПК-3-н

Задание 1. Изучите механизмы фотохимического инициирования образования полимерных материалов.

Задание 2. Опишите механизм плазмохимического образования полимеров из паров мономеров.

Задание 3. Предложите алгоритм проведения квантово-химических исследований в химии высоких энергий.

Задание 4. Оцените роль синглетного кислорода в реакциях фотоокисления органических веществ.

5.2.5. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ПК-1-т

Задание 1. Охарактеризуйте фотолитографические процессы на основе привитой полимеризации.

Задание 2. Опишите способы увеличения плазмостойкости резистных масок фоторезистов.

Задание 3. Опишите наиболее актуальные проблемы современной фотолитографии.

Задание 4. Опишите наиболее актуальные проблемы современной электронной литографии.

5.2.6. Темы курсовых работ, эссе, рефератов

1. Химия высоких энергий как теоретическая основа фотолитографии.
2. Плазмохимические технологии.
3. Фотополимеризация.
4. Плазмохимические технологии модификации свойств поверхности материалов.
5. Перенос атома водорода в фотохимических реакциях с участием карбонильных соединений и нитросоединений.
6. Фотохимия ароматических азидов.
7. Плазмохимические способы формирования халькогенидных стекол.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Теоретическая подготовка к лабораторным занятиям и промежуточной аттестации может осуществляться по следующим литературным источникам:

6.1. Основная литература

1. Зеленцов С.В. Введение в фотохимию. Учебное пособие. – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета. 2006.-183с.
2. Зеленцов С.В. Фотохимические реакции органических соединений.. Учебное пособие. – Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета. 2007.-188с.
3. Введение в фотохимию органических соединений, под ред. Г.О. Беккера. - Л.:Химия, 1976.- 384с.
4. Барлтроп, Дж.; Койл, Дж.; Возбужденные состояния в органической химии.-М.: Мир, 1978.-448с.
5. Бугаенко, Л.Т.; Кузьмин, М.Г.; Полак, Л.С.; Химия высоких энергий, Мю: Химия, 1988. – 368с.

6.2. Дополнительная литература

1. Окабе Х. Фотохимия малых молекул. М., Мир, 1981.

2. Барачевский В.А., Лашков Г.И., Цехомский В.А. Фотохромизм и его применение. - М.: Химия, 1977.
3. Фотохимические процессы в слоях /Под ред. А.В. Ельцова. - Л.: Химия, 1978.
4. Багдасарян Х.С. Двухквантовая фотохимия.- М.: Наука, 1976.
5. Турро, Н.; Молекулярная фотохимия.-М.: Мир, 1967.- 328 с.

6.3. Интернет-ресурсы

Программный комплекс NWChem 6.8, Gaussian 03.

<http://www.chem.msu.su/rus/teaching/kinetics-exp/photochem/photochem.pdf>

<http://www.photonics.ru/common/history.aspx>

<https://edu.epfl.ch/coursebook/en/photochemistry>

<https://www.degruyter.com/downloadpdf/>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Помещения представляют собой учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных программой, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения: к.306а, 306, 306б – ННГУ 5 корпус.

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 ФГОС ВО с учетом рекомендаций и ОПОП ВО по направлению подготовки 04.03.01 – Химия, направленность «Химия и материаловедение».

Автор:

_____ д.х.н., доцент С.В. Зеленцов

Рецензент:

_____ д.т.н., доцент Н.В. Старостин

Заведующий кафедрой:

_____ д.х.н., профессор А.В. Маркин