

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
Державна наукова установа «Науково-технологічний комплекс
«Інститут монокристалів» НАН України»

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Генеральний директор



Робоча програма навчальної дисципліни

Будова речовини та сучасні методи дослідження

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти третій (освітньо-науковий) рівень
галузь знань 10 – природничі науки
напрям підготовки 102 – хімія

Харків 2020

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою НТК ІМК НАНУ
«14» березня 2019 року, протокол № 5

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

доктор хімічних наук, професор Десенко Сергій Михайлович,
кандидат хімічних наук, доцент Коміхов Сергій Олександрович,
кандидат хімічних наук Шишкіна Світлана Валентинівна.

Гарант освітньо-наукової програми «Хімія» С.Д. д.х.н., проф. С.М. Десенко

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Будова речовини та сучасні методи дослідження” складена відповідно до освітньо-наукової програми підготовки третього рівня

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є сформувати у аспірантів міцне фундаментальне уявлення про молекулярну будову органічних сполук та фізичні методи, які лежать в основі її дослідження, закономірності їх хімічних перетворень та питання молекулярного моделювання.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є:

- надати поглиблені теоретичні основи органічної хімії та механізмів реакцій органічних сполук;
- познайомити аспірантів із сучасними спектральними методами дослідження будови та методами рентгеноструктурного аналізу синтетичним та аналітичним обладнанням та принципами його роботи;
- надати практичні навички інтерпретації спектральних даних та квантовохімічних розрахунків.

1.3. Кількість кредитів **11**

1.4. Загальна кількість годин **330**

1.5. Характеристика навчальної дисципліни

Дисципліна вільного вибору

Денна форма навчання

Рік підготовки

2-й

Семестр

3-й

4-й

Лекції

30 год.

30 год.

Практичні, семінарські заняття

12 год.

12 год.

Самостійна робота

123год.

123 год.

Форма контролю

залік

екзамен

1.6. Заплановані результати навчання

знати: електронні та просторові ефекти, відповідальні за будову органічних сполук, особливості їх кислотно-основної взаємодії, фізичні основи спектральних методів дослідження будови, включаючи ЯМР, ІЧ-спектроскопію, мас-спектрометрію; основи рентгеноструктурного аналізу; теорію квантовохімічних розрахунків.

вміти: здійснювати аналіз фізичних/хімічних властивостей сполуки на основі її молекулярної будови; здійснювати інтерпретацію спектральних даних сполуки; робити квантовохімічні розрахунки молекулярної будови.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Теорія електронної будови органічних сполук.

Лекції:

Тема 1. Хімічні зв'язки в органічних молекулах.

Октетна теорія Льюїса. Типи хімічних зв'язків: ковалентний, іонний. Багатоцентрові зв'язки. Гідрогенний (водневий) зв'язок. Молекулярні комплекси.

Тема 2. Електронні ефекти у органічних сполуках.

Індуктивний і мезомерний ефекти, ефект поля. Принцип адитивності та його застосування для якісної оцінки електронної будови сполуки.

Тема 3. Кислотність та основність органічних сполук. Кислотно-основна рівновага за Бренстедом. Якісна оцінка впливу будови сполуки на її кислотність/основність. Теорія кислот та основ Льюїса.

Семінари.

Теорія електронної будови органічних сполук у практичному використанні.

Розділ 2. Стереохімія органічних сполук.

Лекції:

Тема 4. Статична стереохімія.

Енантіомери та хіральність. Види хіральності. Діастереомери. Еквівалентні, енантіотопні, діастереотопні функціональні групи.

Тема 5. Динамічна стереохімія.

Конформація та конфігурація. Фактори відносної стабільності конформерів. Конформації ацикліческих та цикліческих сполук.

Семінари.

Стереохімія органічних сполук.

Розділ 3. Фізико-хімічні методи дослідження будови органічних сполук.

Лекції:

Тема 6. Метод ЯМР для структурних досліджень.

Інформація, яку надають спектри ЯМР про будову сполуки. Основи методу ЯМР. Основні параметри спектру ЯМР та їх зв'язок з будовою сполуки.

Тема 7. Експеримент ЯМР.

Складові ЯМР-спектрометру і вимірювання спектру. Параметри імпульсу і параметри спектру.

Тема 8. Спеціальні методи спектроскопії ЯМР.

Ядерний ефект Оверхаузера. Спектри NOESY, COSY.

Тема 9. Основи мас-спектрометрії.

Інформація, яку отримують з мас-спектру речовини. Спектри електронної іонізації. Молекулярний іон і фрагментація.

Тема 10. М'які методи іонізації у мас-спектрометрії.

Хімічна іонізація, хімічна іонізація при атмосферному тиску, іонізація електроспреєм, лазерна іонізація.

Тема 11. ІЧ спектроскопія.

Діапазон ІЧ спектроскопії та природа ІЧ спектру. Параметри ІЧ спектру. Типи молекулярних коливань. Характеристичні частоти та їх залежність від факторів структури. Сучасні підходи в ІЧ спектроскопії.

Тема 12. Рентгеноструктурний аналіз 1.

Особливості дослідження будови речовини в твердому стані. Методи рентгеноструктурного та рентгенофазового аналізу. Фізичні основи методу. Теорія симетрії.

Тема 13. Рентгеноструктурний аналіз 2.

Математичний апарат обробки даних рентгеноструктурного експерименту, розшифровки та уточнення структури. Прецизійні рентгеноструктурні дослідження.

Тема 14. Рентгеноструктурний аналіз 3.

Аналіз даних, отриманих з рентгеноструктурного експерименту. Робота з базами даних.

Практичні заняття.

1. Основи інтерпретації спектрів ЯМР.
2. Спеціальні методи спектроскопії ЯМР.
3. Спектри електронної іонізації. Молекулярний іон і фрагментація.
4. М'які методи іонізації у мас-спектрометрії.
5. Методи рентгеноструктурного та рентгенофазового аналізу.
6. Аналіз даних, отриманих з рентгеноструктурного експерименту.

Розділ 4. Механізми реакцій органічних сполук.

Лекції:

Тема 15. Реакційна здатність органічних сполук.

Класифікація органічних реакцій. Типи реагуючих частинок. Перехідний стан та інтермедіат реакції. Постулат Хемонда. Емпіричний підхід до оцінки реакційної здатності.

Тема 16. Карбкатіони та карбаніони як реакційні інтермедіати.

Реакції, які перебігають з утворенням карбкатіонів та карбаніонів. Стабільність заряджених частинок та фактори, які її визначають. Хімічні властивості карбкатіонів та карбаніонів. Катіонні перегрупування.

Тема 17. Вільні радикали.

Утворення вільних радикалів в результаті гомолітичної диссоціації. Стабільність радикальних частинок та їх перетворення. Карбени, іон-радикали.

Тема 18. Нуклеофіл та електрофіл в органічних реакціях.

Реакції нуклеофільного заміщення та нуклеофільного приєднання в аліфатичних сполуках. Реакція елімінування. Електрофільне заміщення у ароматичному ядрі.

Тема 19. Перициклічні реакції.

Загальна характеристика перициклічних реакцій. Електроциклічні реакції. Реакції циклоприєднання. Сігматропні реакції.

Семінари.

Механізми реакцій органічних сполук.

Розділ 5. Сучасні підходи комп'ютерної хімії для вивчення будови речовини

Лекції:

Тема 20. Загальні напрямки комп'ютерного моделювання в хімії – 1.

Моделювання ізольованих молекул та їх властивостей. Класична та квантова механіка. Короткий огляд основних наближень квантової хімії. Обчислювані параметри: структурні, термодинамічні, спектральні (ІЧ-, УФ-, ЯМР-спектри).

Тема 21. Загальні напрямки комп'ютерного моделювання в хімії – 2.

Моделювання конденсованої фази. Молекулярна динаміка класична та ab initio. Обчислювані параметри: структурні, термодинамічні, кінематичні. Згадка про квантову хімію твердого тіла. Згадка про кореляційний аналіз (QSPR, QSAR).

Тема 22. Методи розрахунку атомних та молекулярних параметрів. Індекси реакційної здатності/Заряд атома. Типи обчислюваних зарядів атомів. Заряд атома як індекс реакційної здатності. Ароматичність та індекси ароматичності. Електронегативність атома, жорсткість та м'якість. Атомні радіуси. Поляризовність молекули. Обчислюваний електростатичний потенціал та його застосування. Індекси Фукуї та їх застосування.

Тема 23. Теоретичні підходи до оцінювання реакційної здатності.

Метод NBO: можливості та проблеми застосування. NRT та реакційна здатність. Метод AIM:

можливості та проблеми застосування. Поле лапласіана електронної густини та реакційна здатність. Зв'язок із теорією Гіллеспі. Метод ELF. Шлях реакції та поверхня потенційної енергії.

Тема 24. Вплив оточення молекули на обчислювані властивості

Методи врахування оточення молекули в ab initio моделюванні: неперервне середовище (PCM, COSMO), супермолекула, кластерна модель, періодичний потенціал. Міжмолекулярна взаємодія. Проблеми обчислення енергії взаємодії. Особливості розрахунку енергій специфічних та неспецифічних взаємодій. Методи оцінювання та фракціонування енергій взаємодії. Вплив середовища на обчислювані властивості: структурні параметри, ГЧ-спектри, УФ-спектри, ЯМР-спектри.

Тема 25. Популярні програмні пакети комп'ютерного моделювання: можливості та особливості застосування

Обчислювальні ресурси, необхідні для розрахунку різних властивостей та параметрів. Молекулярне моделювання: GAUSSIAN, NWChem, Orca, GAMESS US, Turbomole. Моделювання конденсованої фази: CASTEP, CRYSTAL, Quantum Espresso; GROMACS, Amber тощо.

Практичні заняття.

7. Методи розрахунку атомних та молекулярних параметрів.

8. Теоретичні підходи до оцінювання реакційної здатності

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин			
	Усього	У тому числі		
		лекції	практичні та семінарські заняття	самостійна робота
Семестр 3				
Розділ 1.				
Тема 1	9	2	–	7
Тема 2	10	2	–	8
Тема 3	11	2	1	8
Розділ 2.				
Тема 4	9	2	–	7
Тема 5	11	2	1	8
Розділ 3.				
Тема 6	11	2	1	8
Тема 7	10	2	–	8
Тема 8	14	3	2	9
Тема 9	13	2	1	10
Тема 10	14	2	2	10
Тема 11	12	2	–	10
Тема 12	14	2	2	10

Тема 13	12	2	–	10
Тема 14	15	3	2	10
Разом за семестр 3	165	30	12	123

Семестр 4

Розділ 4.

Тема 15	16	3	–	12
Тема 16	16	3	–	12
Тема 17	14	2	–	12
Тема 18	14	3	–	11
Тема 19	18	3	4	11

Розділ 5.

Тема 20	15	3	–	12
Тема 21	15	3	–	12
Тема 22	16	2	4	10
Тема 23	16	2	4	10
Тема 24	13	3	–	10
Тема 25	14	3	–	11
Разом за семестр	165	30	12	123
Усього годин	330	60	24	246

3. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Вид, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Тема 1. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з питаннями хімічних зв'язків у органічних молекулах.	7
2	Тема 2. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з електронними ефектами у органічних сполуках.	8
3	Тема 3. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з проблемами кислотності органічних сполук.	8
4	Тема 4. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з видами хіральності та номенклатурою хіральних сполук.	7
5	Тема 5. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з питаннями конформаційного аналізу.	8
6	Тема 6. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з параметрами спектрів ЯМР та їх залежністю від структури сполуки.	8
7	Тема 7. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами	8

	ознайомитись з фізичними основами ЯМР-експерименту.	
8	Тема 8. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись зі спеціальними методами в спектроскопії ЯМР.	9
9	Тема 9. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з основами мас-спектрометрії.	10
10	Тема 10. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з методами іонізації у мас-спектрометрії, їх перевагами, недоліками.	10
11	Тема 11. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з залежністю параметрів ІЧ спектру від будови речовини.	10
12	Тема 12. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з фізичними основами методу PCA.	10
13	Тема 13. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з математичним апаратом PCA.	10
14	Тема 14. За наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з аналізом даних та базами даних PCA.	10
15	Тема 15. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з теоретичними основами реакційної здатності органічних сполук.	12
16	Тема 16. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з карбкатіонами і карбаніонами та факторами, які визначають їх стабільність.	12
17	Тема 17. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з вільними радикалами та факторами, які визначають їх стабільність.	12
18	Тема 18. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з основними механізмами хімічних перетворень в органічних сполуках.	11
19	Тема 19. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з видами перициклічних реакцій, їх особливостями.	11
20	Тема 20. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з особливостями комп'ютерного моделювання ізольованих молекул.	12
21	Тема 21. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з розрахунками молекулярної динаміки.	12
22	Тема 22. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з індексами реакційної здатності, ароматичності.	10
23	Тема 23. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з теоретичними підходами до оцінки реакційної здатності.	10
24	Тема 24. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з методами оцінки міжмолекулярної взаємодії.	10
25	Тема 25. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з популярними програмами для молекулярного моделювання.	11
	Разом	246

6. Індивідуальні завдання

Немає.

7. Методи контролю

Опитування, залік, екзамен.

8. Схема нарахування балів

Семестр	Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання	Підсумковий контроль	Сума
3	Розділи 1-3	60 залік 40	100
4	Розділи 4,5	60 екзамен 40	100

1. Аспірант допускається до складання заліку або екзамену за умови виконання усіх практичних занять.
2. Екзамен або залік вважається зданим, якщо сума балів набрана при написанні заліку чи екзамену не менше, ніж 15 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Чотирирівнева шкала оцінювання	Дворівнева шкала оцінювання
	Оцінка	
90 – 100	відмінно	
70-89	добре	зараховано
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

9. Рекомендоване методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Описи практичних занять.

Базова література

1. Smith M. B. March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure. 7th Ed. Wiley: 2013. 2080 p.
2. Hornback J. M. Organic Chemistry. 2nd Ed. Brooks Cole: 2005.
3. Clayden J., Greeves N., Warren S. Organic Chemistry. 2nd Ed. Oxford University Press: 2012. 1261 p.
4. Smith R. M. Understanding Mass Spectra: a Basic Approach. 2nd Edition. Wiley: 2004. -372p.
5. Gross J. Mass-spectrometry. 1st Ed. Springer: 2004. 518 p.
6. de Hoffmann E., Stroobant V. Mass Spectrometry: Principles and Applications, 3rd Edition. Wiley, 502 p.
7. Chhabil Dass. Fundamentals of Contemporary Mass Spectrometry. John Wiley & Sons, Inc.: 2006. 585 p.
8. В. С. Урусов. Теоретическая кристаллохимия. Изд. МГУ.-1987.
9. М. П. Шаскольская. Кристаллография. –М.: Высшая школа, 1976.
10. Л. А. Асланов, Е. Н. Треушников. Щновы теории дифракции рентгеновских лучей. Изд. МГУ, 1985.
11. Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975.
12. J. D. Wright. Molecular crystals. Cambridge University Press, 1995.-221 p.
13. Молекулярные структуры. Прецизионные методы исследования. Под ред. А. Доменикано, И. Харгиттаи.- М.: Мир, 1997.
14. Г. Б. Бокий. Кристаллохимия. – М.: Наука, 1971.
15. М. А. Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений. – М.: Высшая школа, 1989.
16. B. Moulton, M. J. Zaworotko. From Molecules to Crystal Engineering: Supramolecular Isomerism and Polymorphism in Network Solids // Chem. Rev., 2001, v.101, p.1629-1658.
17. T. S. Koritsanszky, P. Coppens. Chemical applications of X-ray charge-density analysis. // Chem. Rev., 2001, v.101, p.1583-1627.

Допоміжна література

1. OsakaUx: METAB101x: Metabolomics in Life Sciences. <https://courses.edx.org/courses/course-v1:OsakaUx+METAB101x+3T2017/course/>
2. Mass Spectrometry and Infrared Spectroscopy. <http://www.aklectures.com/subject/organic-chemistry/#157&248-Mass%20Spectrometry%20and%20Infrared%20Spectroscopy>