

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Державна наукова установа «Науково-технологічний комплекс
«Інститут монокристалів»

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Перший заступник генерального
директора з наукової роботи
Валентин ЧЕБАНОВ
«23» листопада 2024 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Сучасні методи дослідження будови органічних речовин

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти _____ третій (освітньо-науковий) рівень

галузь знань _____ 10 – природничі науки

напрямок підготовки _____ 102 – хімія

Харків 2024

Програму розглянуто та рекомендовано до затвердження Вченою радою
ІХФМ НТК ІМК НАНУ

« 22 » жовтня 2024 року, протокол № 2

Голова Вченої ради,

Перший заступник генерального директора з наукової роботи




Валентин ЧЕБАНОВ

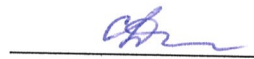
РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

кандидат хімічних наук Токарев Віктор Володимирович,

кандидат хімічних наук, старший дослідник Шишкіна Світлана Валентинівна.

Гарант освітньо-наукової програми «Хімія»

д.х.н., проф.


Сергій ДЕСЕНКО

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Сучасні методи дослідження будови органічних речовин” 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 фізичні методи, які лежать в основі дослідження будови органічних сполук та молекулярного моделювання.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є:

- 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 квантово-хімічних розрахунків.

1.3. Кількість кредитів **6**

1.4. Загальна кількість годин **180**

1.5. Характеристика навчальної дисципліни

Дисципліна вільного вибору

Форма навчання - денна

Рік підготовки – 2

Семестр – 4

Лекції – 32 годин

Практичні, семінарські заняття – 14 годин

Самостійна робота – 134 годин

Форма контролю - екзамен

1.6. Заплановані результати навчання

знати: фізичні основи спектральних методів дослідження будови, включаючи ЯМР, ІЧ-спектроскопію, мас-спектрометрію; основи рентгеноструктурного аналізу; теорію квантовохімічних розрахунків.

вміти: здійснювати інтерпретацію спектральних даних сполуки; робити квантово-хімічні розрахунки молекулярної будови.

Набути компетентностей:

ЗК7. Розуміння значення дотримання етичних норм та авторського права, забезпечення академічної доброчинності при проведенні наукових досліджень, презентації їхніх результатів та у науково-педагогічній діяльності; розуміти неприйнятність академічного шахрайства, включаючи плагіат та самоплагіат.

ФК1. Наявність глибоких обґрунтованих знань в галузі хімії, детальне розуміння підходів до створення і застосування новітніх матеріалів і речовин, вміння проводити експериментальні і теоретичні дослідження.

ФК2. Розуміння теоретичних засад, що лежать в основі методології проведення теоретичних і експериментальних досліджень.

ФК3. Знання сучасного стану, засад і принципів розвитку хімічної науки на міжнародному, міждержавному, державному та регіональному рівнях.

ФК4. Наявність фундаментальної бази з сучасного хімічного матеріалознавства; уявлення про методи створення, властивості та сфери використання монокристалів, кераміки, тонких плівок, рідкокристалічних матеріалів, органічних люмінофорів, барвників, та ін.

ФК5. Міцні фундаментальні уявлення про молекулярну будову сполук, закономірності їх хімічних перетворень та питання молекулярного моделювання.

ФК6. Знання о сучасних методах синтезу і дослідження будови та складу, які використовуються в неорганічній, органічній та медичній хімії і матеріалознавстві, навички практично використовувати основні з них.

ФК7. Володіння хімічними та інструментальними методами якісного та кількісного аналізу, вміння проводити математичну та статистичну обробку експериментальних даних у відповідності до сучасних вимог.

ФК8. Здатність ініціювати та реалізувати проєкти, які дають можливість переосмислити наявне та створити нове цілісне знання та/або професійну практику і розв'язання значущих проблем хімії; спроможність до лідерства та повної автономності під час їх реалізації.

ФК9. Спроможність спілкуватись в хімічній галузі в діалоговому режимі в різномовному середовищі.

ФК10. Соціальна відповідальність за результати прийняття стратегічних технічних рішень, пов'язаних з навколишнім середовищем.

ФК11. Здатність до постійного самовдосконалення у професійній сфері, відповідальність за навчання інших при проведенні науково-педагогічної діяльності та наукових досліджень в хімічній галузі.

Отримати результати навчання:

РН2. Проявляти наукові погляди та підходи при оцінюванні варіантів створення нових речовин і матеріалів та факторів локального і глобального впливу на їх структуру та властивості.

РН3. Знання основних можливостей наукової співпраці для природничо-математичних наук, перспектив міждисциплінарних досліджень, визначаючи позитивні/негативні аспекти власної області дослідження.

РН5. Уміння описувати закономірності та принципи створення і застосування нових речовин та матеріалів.

РН6. Уміння інтегрувати наявні методики та методи хімічних досліджень та адаптувати їх для розв'язання конкретних наукових завдань при проведенні наукових досліджень.

РН7. Визначатись з факторами та критеріями, які необхідно враховувати при оцінці наслідків впливу хімічних виробництв на стан довкілля.

РН8. Опановувати та реалізовувати на практиці оригінальні самостійні наукові дослідження, які мають суттєву новизну, теоретичну і практичну цінність та сприяють розв'язанню соціальних, економічних, наукових та інших проблем.

РН9. Розробити оригінальний практичний курс з фахової дисципліни, враховуючи сучасний стан наукових знань та особисті дослідницькі навички.

РН11. Володіння навичками роботи з сучасним обладнанням при проведенні експериментальних досліджень.

РН17. Вміння координувати роботу дослідницької групи, організовувати колективну роботу.

РН18. Дотримування етичних норм, враховуючи авторське право та норми академічної доброчесності при проведенні наукових досліджень, презентації їх результатів та у науково-педагогічній діяльності.

РН19. Вміння знайти оригінальне рішення, направлене на розв'язання конкретної науково-технічної проблеми.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Фізико-хімічні методи дослідження будови органічних сполук.

Лекції:

Тема 1. 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 2. Експеримент ЯМР.

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

Тема 3. Спеціальні методи спектроскопії ЯМР.

Ядерний ефект Оверхаузера. Спектри NOESY, COSY.

Тема 4. Основи мас-спектрометрії.

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

Тема 5. М'які методи іонізації у мас-спектрометрії.

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

Тема 6. 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 7. Рентгеноструктурний аналіз 1.

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

Тема 8. Рентгеноструктурний аналіз 2.

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

Тема 9. Рентгеноструктурний аналіз 3.

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

Практичні заняття.

1. Основи інтерпретації спектрів ЯМР та спеціальні методи спектроскопії ЯМР.

2. Спектри електронної іонізації. Молекулярний іон і фрагментація.

3. М'які методи іонізації у мас-спектрометрії.

4. Методи рентгеноструктурного та рентгенофазового аналізу та аналіз даних, отриманих з рентгеноструктурного експерименту.

Розділ 2. Сучасні підходи комп'ютерної хімії для вивчення будови речовини

Лекції:

Тема 10. 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 11. 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 12. Методи розрахунку атомних та молекулярних параметрів. Індеси реакційної здатності/Заряд атома. Типи обчислюваних зарядів атомів. Заряд атома як індекс реакційної здатності. Ароматичність та індеси ароматичності. Електронегативність атома, жорсткість та м'якість. Атомні радіуси. Поляризованість молекули. Обчислюваний електростатичний потенціал та його застосування. Індеси Фукуї та їх застосування.

Тема 13. 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 14. 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, ІЧ-спектри, УФ-спектри, ЯМР-спектри.

Тема 15. 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.

5. Методи розрахунку атомних та молекулярних параметрів.

6. 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
Розділ 1.				
Тема 1	11	2	1	8
Тема 2	10	2	–	8
Тема 3	12	2	1	9
Тема 4	13	2	2	9
Тема 5	13	2	2	9
Тема 6	12	2	–	10
Тема 7	15	3	2	10
Тема 8	13	3	–	10
Тема 9	14	2	2	10
Розділ 2.				
Тема 10	12	2	–	10
Тема 11	11	2	–	9
Тема 12	12	2	2	8
Тема 13	12	2	2	8
Тема 14	10	2	–	8
Тема 15	10	2	–	8
Усього годин	180	32	14	134

4. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Вид, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Тема 1. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з параметрами спектрів ЯМР та їх залежністю від структури сполуки.	8
2	Тема 2. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з фізичними основами ЯМР-експерименту.	8
3	Тема 3. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись зі спеціальними методами в спектроскопії ЯМР.	9
4	Тема 4. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з основами мас-спектрометрії.	9
5	Тема 5. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з методами іонізації у мас-спектрометрії, їх перевагами, недоліками.	9
6	Тема 6. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з залежністю параметрів ІЧ спектру від будови речовини.	10
7	Тема 7. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з фізичними основами методу РСА.	10
8	Тема 8. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з математичним апаратом РСА.	10
9	Тема 9. За наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з аналізом даних та базами даних РСА.	10
10	Тема 10. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з особливостями комп'ютерного моделювання ізольованих молекул.	10
11	Тема 11. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з розрахунками молекулярної динаміки.	9
12	Тема 12. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайо-	8

	митись з індексами реакційної здатності, ароматичності.	
13	Тема 13. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з теоретичними підходами до оцінки реакційної здатності.	8
14	Тема 14. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з методами оцінки міжмолекулярної взаємодії.	8
15	Тема 15. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з популярними програмами для молекулярного моделювання.	8
	Разом	134

5. Методи контролю

Опитування, екзамен.

6. Схема нарахування балів

Семестр	Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання, опитування		Підсумковий контроль	Сума
4	Розділи 1-2		екзамен 40	100
	ПЗ 1	10		
	ПЗ 2	10		
	ПЗ 3	10		
	ПЗ 4	10		
	ПЗ 5	10		
	ПЗ 6	10		

- Аспірант допускається до складання екзамену за умови виконання усіх практичних занять.
- Екзамен 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
	Оцінка
90 – 100	відмінно
70-89	добре
50-69	задовільно
1-49	незадовільно

7. Рекомендоване методичне забезпечення

- Робоча програма навчальної дисципліни.
- Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
- Описи практичних занять.

Базова література

de Hoffmann E., Stroobant V. Mass Spectrometry: Principles and Applications, 3rd Edition. Wiley, 502 p.

- J. D. Wright. Molecular crystals. Cambridge University Press, 1995.-221 p.
- 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.
- T. S. Koritsanszky, P. Coppens. Chemical applications of X-ray charge-density analysis. // Chem. Rev., 2001, v.101, p.1583-1627.
- Mass Spectrometry: Instrumentations, Interpretation and Application / Ed. by Ekman R., Silberring J., Westman-Brinkmalm A., Kraj A. Wiley: 2008. 390 p.
- Pavia D. L., Lampman G. M., Kriz G. S., Vyvyan J. R. Introduction to Spectroscopy. CENGAGE Learning: 2013. 784 p.
- Mitchell T. N., Costisella B. NMR - from spectra to structures: an experimental approach. 2nd ed. Springer: 2007. 220 p.

7. Keeler J. Understanding NMR Spectroscopy. Wiley: 2002. 212 p.
8. Günzler H., Gremlich H.-U. IR Spectroscopy: An Introduction. Wiley-VCH: 2002. 362 p.
9. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry, 3rd ed. Wiley: 2017. 664 p.
10. Piela L. Ideas of Quantum Chemistry. Elsevier: 2020. 795 p.
11. Dronskowski R. Computational Chemistry of Solid State Materials. A Guide for Materials Scientists, Chemists, Physicists and others. Wiley-VCH: 2005. 302 p.

Допоміжна література

1. Mass Spectrometry and Infrared Spectroscopy. <http://www.aklectures.com/subject/organic-chemistry/#157&248-Mass%20Spectrometry%20and%20Infrared%20Spectroscopy>
2. Struve W. S. Fundamentals of Molecular Spectroscopy. Wiley: 1989. 299 p.