

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

СИЛАБУС

Будова речовини та сучасні методи дослідження

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти	_____	третій (освітньо-науковий) рівень	_____
галузь знань	_____	10 – природничі науки	_____
напрямок підготовки	_____	102 – хімія	_____
рік навчання	_____	2021-2022	_____

РОЗРОБНИКИ КУРСУ (ВИКЛАДАЧІ):

1. доктор хімічних наук, професор **Десенко Сергій Михайлович**

кімната 429 ЛВК

тел. роб. 341-02-54

тел. моб. 067 576 0279

Адреса для електронного листування: desenko3@gmail.com

Профіль у scopus: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603680670>

2. кандидат хімічних наук **Шишкіна Світлана Валентинівна**

кімната 235 ЛВК

тел. роб. 341-02-58

тел. моб. 066 771 8742

Адреса для електронного листування: sveta@xray.isc.kharkov.com

Профіль у scopus: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57196285979>

3. кандидат хімічних наук **Жикол Олег Анатолійович**

кімната 211 ЛВК

тел. моб. 097 411 0159

Адреса для електронного листування: zhikol@xray.isc.kharkov.com

Профіль у scopus: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6507065569>

Характеристика навчальної дисципліни: кількість кредитів 11 , загальна кількість годин 330	
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

РОЗКЛАД ЗАНЯТЬ у 3 семестрі 2021-2022 навчального року

Викладач	День тижня, час	Дата	Вид заняття	Місце
Професор Десенко Сергій Михайлович	Вівторок 11.00– 12.20 12.40– 13.20	02.11	лекція, 3 години	Кімната 211 / 429 або дистанційно MLS платформа ZOOM
		09.11	лекція, 3 години	
		16.11	лекція, 3 години	
		23.11	лекція, 2 години практичне, 1 година	
		30.11	лекція, 3 години	
		07.12	лекція, 3 години	
		14.12	лекція, 2 години	
		21.12	практичне, 2 години	
		04.01	лекція, 3 години	
		11.01	лекція, 3 години	
		18.01	лекція, 2 години практичне, 1 година	
		25.01	лекція, 1 година практичне, 2 години	
		01.02	практичне, 4 години	
08.02	лекція, 2 години			

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. Кисотно-основна рівновага за Бренстедом. Якісна оцінка впливу будови сполуки на її кислотність/основність. Теорія кислот та основ Льюїса.

Практичні заняття

1. 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 ациклічних та циклічних сполук.

Практичні заняття

2. 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 вимірення 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 електроспреем, 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.

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

4. Спектри електронної іонізації. Молекулярний іон і фрагментація.

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

6. Методи рентгеноструктурного та рентгенофазового аналізу та 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. Карбокатиони та карбаніони як реакційні інтермедіати.

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

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.

Практичні заняття

7. 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. Поляризованість 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, ІЧ-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.

8. Методи розрахунку атомних та молекулярних параметрів.

9. Теоретичні підходи до оцінювання реакційної здатності

Методи контролю

Опитування, залік, екзамен.

Схема нарахування балів

Семестр	Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання, опитування		Підсумковий контроль	Сума
3	Розділи 1-3		залік 40	100
	ПЗ 1	10		
	ПЗ 2	10		
	ПЗ 3	10		
	ПЗ 4	10		
	ПЗ 5	10		
	ПЗ 6	10		
4	Розділи 4,5		екзамен 40	100
	ПЗ 7	20		
	ПЗ 8	20		
	ПЗ 9	20		

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	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

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. Основы 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>