

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

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Генеральний директор
академік НАН України

В.П. Семиноженко
«06» липня 2021 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 2022

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою НТК ІМК НАНУ

« 06 » липня 2021 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

кандидат хімічних наук Жикол Олег Анатолійович,

кандидат хімічних наук Шишкіна Світлана Валентинівна.

Гарант освітньо-наукової програми «Хімія»  д.х.н., проф. С.М. 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 сформулювати 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 **5**

1.4. Загальна кількість годин **150**

1.5. Характеристика навчальної дисципліни

Дисципліна вільного вибору

Форма навчання - денна

Рік підготовки – 2

Семестр – 4

Лекції – 30 годин

Практичні, семінарські заняття – 10 годин

Самостійна робота – 110 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.

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 індекси 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		2	1	7
Тема 2		2	—	7
Тема 3		2	1	7
Тема 4		2	1	7
Тема 5		2	1	7

Тема 6		2	–	8
Тема 7		2	1	8
Тема 8		2	–	8
Тема 9		2	1	8
Розділ 2.				
Тема 10		2	–	8
Тема 11		2	–	7
Тема 12		2	2	7
Тема 13		2	2	7
Тема 14		2	–	7
Тема 15		2	–	7
Усього годин	150	30	10	110

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 параметрами спектрів ЯМР та їх залежністю від структури сполуки.	7
2	Тема 2. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з фізичними основами ЯМР-експерименту.	7
3	Тема 3. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись зі спеціальними методами в спектроскопії ЯМР.	7
4	Тема 4. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з основами мас-спектрометрії.	7
5	Тема 5. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з методами іонізації у мас-спектрометрії, їх перевагами, недоліками.	7
6	Тема 6. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з залежністю параметрів ІЧ спектру від будови речовини.	8
7	Тема 7. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з фізичними основами методу РСА.	8
8	Тема 8. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з математичним апаратом РСА.	8
9	Тема 9. За наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з аналізом даних та базами даних РСА.	8
10	Тема 10. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з особливостями комп'ютерного моделювання ізольованих молекул.	8
11	Тема 11. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з розрахунками молекулярної динаміки.	7
12	Тема 12. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з індексами реакційної здатності, ароматичності.	7
13	Тема 13. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з теоретичними підходами до оцінки реакційної здатності.	7
14	Тема 14. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з методами оцінки міжмолекулярної взаємодії.	7
15	Тема 15. За матеріалами посібників та наявними інтернет-ресурсами ознайомитись з популярними програмами для молекулярного моделювання.	7
	Разом	110

6. Методи контролю

Опитування екзамен.

7. 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		

1. Аспірант допускається до складання екзамену за умови виконання усіх практичних занять.
2. 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

9. Рекомендоване методичне забезпечення

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

Базова література

1. de Hoffmann E., Stroobant V. Mass Spectrometry: Principles and Applications, 3rd Edition. Wiley, 502 p.
2. В. С. Урусов. Теоретическая кристаллохимия. Изд. МГУ.-1987.
3. М. П. Шаскольская. Кристаллография. –М.: Высшая школа, 1976.
4. Л. А. Асланов, Е. Н. Треушников. Основы теории дифракции рентгеновских лучей. Изд. МГУ, 1985.
5. Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975.
6. J. D. Wright. Molecular crystals. Cambridge University Press, 1995.-221 p.
7. Молекулярные структуры. Прецизионные методы исследования. Под ред. А. Доменикано, И. Харгиттаи.- М.: Мир, 1997.
8. Г. Б. Бокий. Кристаллохимия. – М.: Наука, 1971.
9. М. А. Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений. – М.: Высшая школа, 1989.
10. 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.
11. T. S. Koritsanszky, P. Coppens. Chemical applications of X-ray charge-density analysis. // Chem. Rev., 2001, v.101, p.1583-1627.
12. Mass Spectrometry: Instrumentations, Interpretation and Application / Ed. by Ekman R., Silberring J., Westman-Brinkmalm A., Kraj A. Wiley: 2008. 390 p.
13. Mitchell T. N., Costisella B. NMR - from spectra to structures: an experimental approach. 2nd ed. Springer: 2007. 220 p.
14. Keeler J. Understanding NMR Spectroscopy. Wiley: 2002. 212 p.
15. Günzler H., Gremlich H.-U. IR Spectroscopy: An Introduction. Wiley-VCH: 2002. 362 p.
16. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. Wiley: 1999. 444 p.

Допоміжна література

1. Mass Spectrometry and Infrared Spectroscopy. <http://www.aklectures.com/subject/organic-chemistry/#157&248-Mass%20Spectrometry%20and%20Infrared%20Spectroscopy>