



Основная профессиональная образовательная программа
04.06.01 Химические науки
(Физическая химия)


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра русского языка и методики преподавания

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП


(подпись) Сырбу С.А.

« 13 » июня 20 18 г.

Рабочая программа дисциплины

Методы определения молекулярной структуры

Уровень высшего образования:	Подготовка кадров высшей квалификации
Квалификация выпускника:	Исследователь. Преподаватель-исследователь
Направление подготовки:	04.06.01 Химические науки
Направленность (профиль) образовательной программы:	Физическая химия

Иваново



1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Методы определения молекулярной структуры» являются следующие: закрепление способности самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области изучения строения свободных молекул и молекулярных структур в конденсированном состоянии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий, а также способности планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина относится к дисциплинам по выбору вариативной части образовательной программы и рассчитана на проведение лекционных и практических занятий в течение 5 семестра.

Успешное освоение данной дисциплины будет способствовать готовности студентов к прохождению практики по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности (исследовательской), научно-исследовательской деятельности, подготовке научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата химических наук, формировать навыки работы с научной периодикой с использованием фондов специализированных научных библиотек), а также поисковых систем *biblioclub.ru*, *elibrary.ru* и *scirus.com*.

Аспирант, приступающий к изучению дисциплины, должен обладать знаниями основных законов физической химии; умениями самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области изучения строения свободных молекул и молекулярных структур в конденсированном состоянии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

общефессиональные (ОПК):

ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.

профессиональные (ПК):

ПК-1 владением теорией и навыками практической работы по тематике «Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ».

ПК-2 владением теорией и методиками экспериментального определения термодинамических свойств веществ, расчета термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучения термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов.

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с формируемыми компетенциями

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

-современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в химической сфере деятельности (ОПК-1);



- методики определения различных молекулярных свойств с помощью квантово-химических расчетов (ПК-1);
- теоретические основы газовой электронографии и методики интерпретации электронографических данных (ПК-2);
- теоретические основы рентгеноструктурного анализа (ПК-2).

Уметь:

- выбирать и применять в профессиональной деятельности химика экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования (ОПК-1);
- планировать и решать задачи, связанные с определением молекулярной структуры экспериментальными и теоретическими методами (ПК-1);
- самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность, описывать полученные результаты и найденные закономерности, формулировать выводы (ПК-2);
- представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (ПК-2).

Владеть:

- навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых химических исследований (ОПК-1);
- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов (ОПК-1);
- современными методами исследования молекулярной структуры (ПК-1);
- навыками выявления закономерностей и особенностей в рядах исследуемых соединений (ПК-2);
- навыками краткого и развернутого описания результатов экспериментального и теоретического исследования структуры молекул (ПК-2).

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 2 зачетных единицы (72 академических часа)

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

№ п/п	Подразделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах, по очной форме обучения)		Формы текущего контроля успеваемости (по очной форме обучения) Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекцион- ного типа	Занятия семинар- ского типа	
1	Электронографический метод исследования строения свободных молекул		6	8	Отчет по практической работе
2	Рентгеноструктурный анализ кристаллов		6	4	Отчет по практической работе
3	Методики определения различных молекулярных свойств с помощью квантово-химических расчетов		6	6	Отчет по практической работе



Основная профессиональная образовательная программа
04.06.01 Химические науки
(Физическая химия)

Итого:		18	18	Зачет
--------	--	----	----	-------

4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

№ раздела	№ лекции	Основное содержание лекций
1	1	Электроннографический метод исследования строения свободных молекул.
	2	Теоретические основы газовой электроннографии. Методики интерпретации электроннографических данных в рамках статической и динамической моделей молекул.
	3	Методики конформационного анализа. Методики использования результатов квантово-химических расчетов при расшифровке электроннограмм.
2	4	Рентгеноструктурный анализ кристаллов. Теоретические основы рентгеноструктурного анализа.
	5	Структура Кембриджской Базы Кристаллографических Данных (КБКД). Методика использования КБКД для статистического анализа молекулярных структур.
	6	Анализ структурных изменений при переходе «кристалл-газ» на основании электроннографических данных и РСА.
3	7	Методики определения различных молекулярных свойств с помощью квантово-химических расчетов. Современные методы и базисы, используемые для квантово-химических расчетов.
	8	Методики определения конформационных свойств свободных молекул. Методика интерпретации колебательных и электронных спектров.
	9	Методика проведения NBO-анализа распределения электронной плотности в молекуле для описания характеристик химических связей. Методики расчета свойств комплексов, образованных за счет водородных связей.

5. Образовательные технологии

При изучении настоящей дисциплины используются следующие инновационные образовательные технологии:

- учебно-исследовательские задачи в сочетании с активно-деятельным подходом, предусматривающие индивидуальное выполнение обучающимися практических заданий по тематике лекций;
- технология «дебаты», технология учебной дискуссии при проведении практических занятий;
- интерактивные информационные технологии (электронный учебник; тестирующие системы; образовательные порталы; электронные энциклопедии; ЭИОС «Мой университет»);
- технология развития критического мышления; проблемное обучение;
- технологии смешанного обучения (мультимедийная, проектная технология, презентационная графика)

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Учебно-методическое обеспечение дисциплины включают электронный вариант ряда лекций. Для организации внеаудиторной самостоятельной работы предусмотрены 4 практических задания по материалам каждого из разделов.



При создании презентаций могут быть использованы программы HyperChem и Gaussian-03 для квантово-химических расчетов, а также программа визуализации результатов квантово-химических расчетов Chemcraft.

Организация самостоятельной работы обучающихся проводится с использованием ЭИОС «Мой университет», где представлены необходимые методические материалы. Комплект необходимой методической литературы имеется также на кафедре.

Методический материал по обеспечению самостоятельной работы обучающихся приводится в Приложении 1 к РП.

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

При выставлении промежуточной аттестации используются оценки: «зачтено», «не зачтено».

«Зачтено» ставится, если обучающимся правильно выполнено более 50% из предложенных практических заданий, а также в виде презентации и статьи обобщен материал по ним. Кроме того, обучающемуся необходимо дать более 50% правильных ответов на предложенные на зачете вопросы.

Рекомендуемые темы практических заданий приведены в методических указаниях (Приложение 1).

Вопросы к зачету представлены в фонде оценочных средств (Приложение 2).

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература

1. Физические методы исследования в органической химии. Спектроскопия радиооптического диапазона и масс-спектрометрия /. - Омск: Омский государственный университет, 2009. - 264 с. - ISBN 978-5-7779-1056-1; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=237133>.

2. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе / Н.Г. Ярышев, Ю.Н. Медведев, М.И. Токарев и др. - Издание второе, переработанное и дополненное. - М. : Прометей, 2015. - 196 с. : схем., ил., табл. - ISBN 978-5-9906134-6-1; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=426720>.

3. Луков, В.В. Физические методы исследования в химии : учебное пособие / В.В. Луков, И.Н. Щербаков. - Ростов : Издательство Южного федерального университета, 2016. - 216 с. : схем., табл., ил. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-9275-2023-7 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=461932>

4. Ведринский Р.В. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебник / Ведринский Р.В. – Ростов н/Д: ЮФУ, 2009 – 384 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937>

5. Ефремов Ю.С. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ефремов Ю.С. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>

6. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / Крашенинин В.И. , Газенаур Е.Г. , Кузьмина Л.В. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>

Дополнительная литература



1. Кручинин Н.Ю. Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах: учебное пособие. [Электронный ресурс]. Издат. ОГУ, 2016. 108 с. ISBN: 978-5-7410-1241-3, УДК: 538(9), ББК: 22.37. Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=439224
2. Заводинский, В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем. Москва: Физматлит, 2013. 175 с.: ил., схем., табл. Режим доступа: по подписке. URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=457710>

программное обеспечение и Интернет-ресурсы

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:
Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»
<https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Международные реферативные базы данных:

WoS Сублицензионный договор № WoS/280 "02" апреля 2018 г. (до 31.12.2018 г.)

Springer, Nature: Исходящее письмо от РФФИ от 21/09/2017 №857. Ответное письмо ИвГУ на бланке от 27.09.2017 №16-784. Доступ с 01/01/2018: Springer Journals, Springer Protocols, Springer Materials, Springer Reference, Nature Journals, zbMath (бессрочно)

База спектральных данных для органических соединений https://sdb.db.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct_frame_top.cgi

База данных NIST Chemistry webbook <https://webbook.nist.gov/chemistry/>

Системы поиска научной информации: <http://elibrary.ru/>; <http://www.sciencedirect.com/>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office, интернет-браузер Yandex Browser. Программы для расчета геометрических и электронных характеристик молекул HyperChem, Gaussian.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

-для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;

-для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, выполнения проектов с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации.



Основная профессиональная образовательная программа
04.06.01 Химические науки
(Физическая химия)

Авторы рабочей программы дисциплины:

проф., д.х.н. Гиричева Н.И.

доц., к.х.н. Федоров М.С.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры неорганической аналитической химии

« 15 » 05 20 19 г., протокол № 10

Программа обновлена

протокол заседания кафедры № 1 от « 29 » 08 2019 г.

Согласовано:

Руководитель ОП  С.А. Сырбу
(подпись)

Программа обновлена

протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ С.А. Сырбу
(подпись)

Программа обновлена

протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20 ____ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ С.А. Сырбу
(подпись)