



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель программы аспирантуры

_____ М.С. Федоров
(подпись)

« _____ » _____ 20 ____ г.

Рабочая программа дисциплины

Методы определения молекулярной структуры

Уровень высшего образования: Подготовка кадров высшей квалификации

Научная специальность: 1.4.4. Физическая химия

Направленность образовательной программы:

Срок освоения образовательной программы: 4 года



1. Цели освоения дисциплины

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 и рассчитана на проведение лекционных и практических занятий в третьем семестре.

Успешное освоение данной дисциплины будет способствовать готовности студентов к выполнению научно-исследовательской деятельности и подготовке диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- основы квантовой механики и квантовой химии, приближения, используемые при решении уравнения Шредингера для молекул;
- основы теорий предсказания пространственного строения молекул (ТОВЭП, теория кристаллического поля и др.)

Уметь:

- выполнять расчеты геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул с помощью программ HyperChem и Gaussian.

Владеть:

- практический опыт формирования входных файлов для квантово-химических расчетов с помощью программ HyperChem и Gaussian, анализа результатов расчетов, который включает рассмотрение геометрического строения молекул, их колебательных спектров, молекулярного объема, диаграмм МО, энергии ионизации, зарядов на атомах, дипольных моментов.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в химической сфере деятельности;
- методики определения различных молекулярных свойств с помощью квантово-химических расчетов;
- теоретические основы газовой электронографии и методики интерпретации электронографических данных;
- теоретические основы рентгеноструктурного анализа.

Уметь:

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

Иметь опыт:



- выполнения критического анализа и поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) информации по тематике проводимых химических исследований;
- проведения планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов;
- использования современных методов исследования молекулярной структуры;
- поиска и установления закономерностей и особенностей структуры в рядах исследуемых соединений;
- выполнения краткого и развернутого описания результатов экспериментального и теоретического исследования структуры молекул.

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	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах)		Формы текущего контроля успеваемости Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	
1.	Электроннографический метод исследования строения свободных молекул	3	2	2	Отчет по практической работе
2.	Рентгеноструктурный анализ кристаллов	3	2	4	Отчет по практической работе
3.	Методики определения различных молекулярных свойств с помощью квантово-химических расчетов	3	4	4	Отчет по практической работе
4.	Заключительный. Подведение и анализ промежуточных результатов освоения дисциплины	3	2		
Итого за семестр:			10	10	Зачет

4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

Электроннографический метод исследования строения свободных молекул.

Теоретические основы газовой электронографии. Методики интерпретации электроннографических данных в рамках статической и динамической моделей молекул.

Методики конформационного анализа. Методики использования результатов квантово-химических расчетов при расшифровке электронограмм.

Рентгеноструктурный анализ кристаллов. Теоретические основы рентгеноструктурного анализа.

Структура Кембриджской Базы Кристаллографических Данных (КБКД). Методика использования КБКД для статистического анализа молекулярных структур.

Анализ структурных изменений при переходе «кристалл-газ» на основании электроннографических данных и РСА.

Методики определения различных молекулярных свойств с помощью квантово-химических расчетов.



Современные методы и базисы, используемые для квантово-химических расчетов.

Методики определения конформационных свойств свободных молекул. Методика интерпретации колебательных и электронных спектров.

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 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 3 практических задания по материалам каждого из разделов.

При создании презентаций могут быть использованы программы для квантово-химических расчетов HyperChem и Gaussian, 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

Промежуточный контроль – зачет

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

«Зачтено» ставится, если обучающимся правильно выполнено более 50% из предложенных расчетных заданий. Кроме того, обучающемуся необходимо дать более 50% правильных ответов на предложенные на письменном зачете вопросы.

Рекомендуемые темы заданий и вопросы к зачету приведены в методических указаниях (Приложение 1).

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература:

1. 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>



2. 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>.
3. Современные методы структурного анализа веществ : учебник : / М. Ф. Куприянов, А. Г. Рудская, Н. Б. Кофанова [и др.] ; Федеральное агентство по образованию Российской Федерации, Южный федеральный университет. – Ростов-на-Дону : Южный федеральный университет, 2009. – 288 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241003> ISBN 978-5-9275-0653-8.

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>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»

<https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

Спектральная база данных SDBS https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi

База данных физико-химических характеристик органических соединений
<https://webbook.nist.gov/chemistry/>

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>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office 365 и LibreOffice, интернет-браузер Yandex Browser, программа визуализации результатов квантово-химических расчетов ChemCraft, программа Gaussian09, Кембриджская база кристаллографических данных.

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 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: электронные пособия (презентации, справочники, базы данных).



Программа аспирантуры
1.4.4. Физическая химия

Авторы рабочей программы дисциплины:

проф., проф., д.х.н. Гиричева Н.И.

доц., доц., к.х.н. Федоров М.С.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной химии

«11» марта 2022 г., протокол №7

Программа обновлена

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

Согласовано:

Руководитель ОП _____ М.С. Федоров
(подпись)