

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
А.С. Князев

« 26 » августа 20 22 г.

Рабочая программа дисциплины

Вычислительные методы в химии

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Химия»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.13

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

 В.В. Шелковников

Председатель УМК

 В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений.

– ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов;

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии;

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности;

ИОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности;

ИОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик;

ИОПК-4.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоение студентами фундаментальных и практических навыков исследований молекул и молекулярных систем современными физическими и физико-химическими методами;

– Научиться применять понятийный аппарат для решения задач в области изменения свойств веществ в зависимости от строения образующих их микрочастиц и воздействия внешних условий;

– Научиться устанавливать взаимосвязь между строением вещества, его физико-химическими свойствами и реакционной способностью.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 6, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам профессионального цикла: Б1.О.14 Неорганическая химия, Б1.О.15.1 Аналитическая химия, Б1.О.16 Органическая химия, Б1.О.17 Физическая химия, а также дисциплинам общепрофессионального блока: Б1.В.08 Квантовая химия, Б1.О.08 физика и Б1.О.07 Математический анализ.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 з.е., 180 часов, из которых:

- лекции: 32 ч.;
- семинарские занятия: 0 ч.
- практические занятия: 48 ч.;
- лабораторные работы: 0 ч.

в том числе практическая подготовка: 48 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Раздел 1. Физические методы исследования строения вещества (лекции)

Тема 1. Классификация физических методов исследования

Краткое содержание темы. Приведены типы классификации физических методов, прямая и обратная задача методов, характеристическое время метода.

Тема 2. Спектроскопические методы.

Краткое содержание темы. Приведена теория взаимодействия света с веществом. Представлены вращательная спектроскопия (микроволновая спектроскопия), колебательная спектроскопия (ИК и КР-спектроскопия), электронная спектроскопия. Основы получения и интерпретация спектров, получение информации о строении и свойствах вещества по спектрам поглощения.

Тема 3. Резонансные методы исследования.

Краткое содержание темы. Основы резонансных методов, классификация. Ядерный магнитный резонанс. Электронный парамагнитный резонанс. Основы получения и интерпретации резонансных спектров.

Тема 4. Масс-спектрометрия.

Краткое содержание темы. Основы процессов ионизации, типы ионов, типы современных масс спектрометров. Основы получения и интерпретация масс-спектров.

Тема 5. Дифракционные методы исследования.

Краткое содержание темы. Основы дифракционных методов, рентгеновское излучение, закон Брэгга. Основы получения и интерпретация рентгенограмм.

Раздел 1. Физические методы исследования строения вещества (практики)

Тема 1. Дипольный момент, поляризуемость.

Краткое содержание темы. Основные понятия, виды поляризуемости. Решение задач по нахождению поляризуемости, дипольного момента с использованием уравнений Дебая, Клазиуса-Моссотти, Лоренца-Лоренца.

Тема 2. Спектроскопические методы.

Краткое содержание темы. Рассмотрение основ молекулярной спектроскопии, решение задач на вращательные спектры (определение геометрических параметров молекул), колебательные спектры (нахождение силовых постоянных, фундаментальных частот поглощения, энергии диссоциации) и электронные спектры (нахождение экстинкции, концентраций растворов, квантового выхода).

Раздел 2. Строение вещества (лекции)

Тема 1. Типы химических частиц.

Краткое содержание темы. Молекулы, ионы, свободные радикалы. Их признаки и свойства. Примеры относительно стабильных радикалов.

Тема 2. Метод фотоэлектронной спектроскопии.

Краткое содержание темы. Общий вид фотоэлектронного спектра. Происхождение структуры фотоионизационных полос. Адиабатический и вертикальный потенциалы ионизации. Теорема Купманса. Границы ее применимости.

Тема 3. Нежесткие молекулы.

Краткое содержание темы. Временной фактор при определении структуры молекул. Характеристическое время (или временное разрешение) метода. Примеры таутомерных превращений.

Тема 4. Туннельный механизм превращений структурно нежестких молекул.

Краткое содержание темы. Условие преобладающего вклада туннелирования. Влияние симметрии потенциального барьера на вероятность туннелирования. Зависимость потенциальной энергии молекулы от инверсионной координаты. Политопные перегруппировки. Зависимость спектра ЯМР нежестких молекул от температуры.

Тема 5. Методы исследования структурно нежестких молекул.

Краткое содержание темы. Аллогональные изомеры. Спиновые изомеры. Электронная природа структурной нежесткости. Нежесткие координаты. Стереохимически и электронно нежесткие системы. Вид волновой функции для электронно нежестких систем. Оптические изомеры или энантиомеры – частный случай стереоизомеров. Особенности строения хиральных молекул.

Тема 6. Нанохимия. Свойства наночастиц.

Краткое содержание темы. Методы исследования наночастиц. Наночастицы на основе углерода. Фуллерены – новые аллотропные модификации углерода. ИК-, КР-спектры фуллеренов и их электронные спектры поглощения. Окисление фуллеренов. Главные факторы, определяющие особенности связи в каркасных и циклических структурах. Соединения включения. Углеродный наноматериал графен. Нанотрубки.

Тема 7. Супрамолекулярная химия.

Краткое содержание темы. Структурные единицы супрамолекулы. Типы взаимодействий между компонентами супрамолекул. Активные компоненты супрамолекулы. Новые свойства супрамолекул. Процессы, обеспечивающие функционирование супрамолекулярных устройств. Способы управления молекулярными устройствами и машинами.

Раздел 2. Строение вещества (практики)

Тема 1. Краткое содержание темы. ИК-спектроскопия. Валентные и деформационные колебания. Характеристические частоты. Способы получения спектров. Расшифровка спектров. КР-спектроскопия. Методы получения спектров. Совместная расшифровка ИК- и КР-спектров.

Тема 2. Краткое содержание темы. Протонный парамагнитный резонанс. Шкала химических сдвигов. Решение задач на обнаружение количества сигналов. Спин-спиновое взаимодействие. Решение задач на установление строения молекул по ПМР-спектрам.

Тема 3. Краткое содержание темы. Структурная масс-спектроскопия. Природа и получение масс-спектров. Молекулярный ион. Пути фрагментации молекул. Решение задач установления структуры молекул по данным масс-спектров.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ, тестов по лекционному материалу, выполнения домашних заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее двух раз в семестр.

Оценивание промежуточных заданий дает возможность студенту и преподавателю отслеживать ход учебного процесса и формирование компетенций соответствующих ИОПК 1.1, ИОПК 1.2, ИОПК 4.2, ИОПК 4.3.

Примеры задач контрольной работы по разделу 1. Физические методы исследования строения вещества:

Задача 1.

Дано: интервалы ΔE между соседними линиями чисто вращательного спектра испускания молекул $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ равны 0,48 мэВ.

Требуется: найти момент инерции J и межъядерное расстояние r молекулы CO

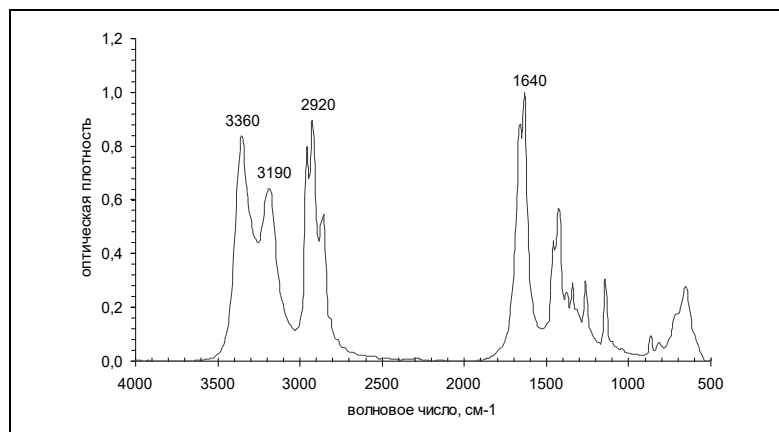
Задача 2.

Дано: энергия диссоциации $D = 9,80$ эВ и собственная круговая частота $\omega = 4,45 \times 10^{14} \text{ с}^{-1}$ молекулы NO.

Требуется: найти коэффициент ангармоничности χ , построить схему энергетических уровней молекулы и отметить на ней энергию диссоциации.

Примеры задач контрольной работы по разделу 2.

Задача 1. Из анализа ИК-спектра предложите структуру соединения $\text{C}_4\text{H}_9\text{NO}$



Задача 2

Какой из двух структур – $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{OCH}_2\text{CH}_3$ или $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ – отвечает спектр ПМР, содержащий триплет, квадруплет и два синглета при δ 1,0; 3,7; 4,6; и 7,3 м.д. соответственно?

Результаты контрольных работ определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в шестом семестре проводится в устной форме по билетам, проверяющим ИОПК 1.3, ИОПК 4.1 и ИОПК 4.3. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Первая часть предполагает развернутые устные ответы на вопросы по разделу 1 «Физические методы исследования строения вещества», вторая часть – по разделу 2 «Строение вещества».

Примеры экзаменационных билетов:

Вопрос 1. Колебательные спектры. Теоретические основы метода ИК-спектроскопии. Колебательный спектр гармонического осциллятора. Силовая постоянная связи. Выражение для энергии гармонического осциллятора. Правила отбора для колебательных спектров гармонического осциллятора (главное и специфическое).

Вопрос 2. Общий вид фотоэлектронного спектра. Происхождение структуры фотоионизационных полос. Адиабатический и вертикальный потенциалы ионизации.

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Студент имеет право проходить промежуточную аттестацию вне зависимости от результатов текущей (при условии демонстрации практических навыков соответствующих ИОПК 1.1 -1.3 и ИОПК 4.1- 4.3).

Оценка «отлично» выставляется студенту в случае полного безошибочного ответа с правильным применением понятий и определений, при демонстрации понимания на дополнительные вопросы.

Оценка «хорошо» выставляется студенту в случае правильного и достаточно полного ответа, не содержащего существенных ошибок, и при демонстрации понимания на дополнительные и наводящие вопросы.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту в случае недостаточно полного объема ответа, наличия ошибок и пробелов в знаниях при ответе на теоретические вопросы.

Оценке «неудовлетворительно» соответствуют неполные и поверхностные ответы, указывающие на отрывочные знания. При ответах на дополнительные и наводящие вопросы допускает существенные ошибки, демонстрирует отсутствие понимания материала.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23524>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План семинарских и практических занятий.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Бенуэлл К. Н. Основы молекулярной спектроскопии. М. : Мир, 1985. – 384 с.
URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000062450/000062450.djvu>

– Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М. : Мир, АСТ, 2003. – 683 с. URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000208638/000208638.pdf>

– Драго Р. Физические методы в химии. М. : Мир, 1981. – 422 с.
URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000048464/000048464.djvu>

– Физические методы исследования в химии: [учеб.-метод. пособие для вузов по специальности «Химия»] / О. К. Базыль – Томск : Изд-во ТГУ, 2013. – 98 с.

– Применение ИК и ПМР спектроскопии при изучении строения органических молекул: [учеб.-метод. пособие для вузов по специальности „Химия“] / Л. Г. Самсонова. – Томск : Изд-во Том. ун-та, 2016. – 60 с.

– Шабатина Т. И., Голубев А. М. Нанохимия и наноматериалы. Учебное пособие. М. : Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана, 2014, – 64 с. URL: <https://www.iprbookshop.ru/30893.html>

б) дополнительная литература:

– Пентин Ю. А., Курамшина Г. М. Основы молекулярной спектроскопии. М. : Мир, БИНОМ, 2008. – 398 с.

– Мальцев А. А. Молекулярная спектроскопия. М. : Московский университет, 1980. – 273 с.

– Бахшиев Н. Г. Введение в молекулярную спектроскопию. Л. : ЛГУ, 1978. – 215 с.

– Бёккер Ю. Спектроскопия. ТЕХНОСФЕРА, 2017. – 525 с.

– Infrared and Raman spectroscopy in Forensic science, Ed by J. M. Chalmers. John Wiley & Sons, Ltd., 2012. – p.612

– Tompson J. M. Infrared Spectroscopy. Pan Stanford Publishing Pte. Ltd. 2018. – p.196.

– Wörner H. J., Merkt F. Fundamentals of Electronic Spectroscopy In book: Handbook of High-resolution , 2011. DOI: 10.1002/9780470749593.hrs069

– Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. Новосибирск : Наука. Сиб. предприятие РАН, 1998. – 334 с.

- Губин С. П., Ткачев С. В. Графен и родственные формы углерода. М. : Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2012. – 104 с.
- Суздалев И. П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М. : Книжный дом ЛИБРОКОМ, 2013. – 592 с.
- Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-на Дону: «Феникс», 1997. – 560 с.
- Фуллерены: Учебное пособие / Л. Н. Сидоров, М. А. Юровская и др. – М. : Изд-во «Экзамен». 2005. – 688 с.
- Сергеев Г. Б. Нанохимия. М. : Изд-во МГУ, 2003. – 288 с.
- Mingsheng Xu, Tao Liang, Minmin Shi, Hongzheng Chen. Graphene-Like Two-Dimensional Materials // Chem. Rev. 2013, 113, 3766–3798 dx.doi.org/10.1021/cr300263a
- Perry T. Yin, Shreyas Shah, Manish Chhowalla Ki-Bum Lee. Design, Synthesis, and Characterization of Graphene–Nanoparticle Hybrid Materials for Bioapplications // Chem. Rev. 2015, 115, 2483–2531 DOI: 10.1021/cr500537t

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
 - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
- б) информационные справочные системы:
 - Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
 - Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
 - ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
 - ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
 - Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
 - ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
 - ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.
 Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.
 Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

1. Фахрутдинова Елена Данияровна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, старший преподаватель.
2. Соколова Ирина Владимировна, д-р физ.-мат. наук, профессор, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, профессор.
3. Самсонова Любовь Гавриловна, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент