

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Структурная химия свободных молекул**

**Уровень высшего образования:**  
Магистратура

---

**Направление подготовки (специальность):**

04.04.01 Химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**

Физическая химия

**Форма обучения:**

очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 августа 2019 г., №1033.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<b>СПК-1.М.</b> Способен использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	<b>СПК-1.М.1.</b> При изучении систем различной природы выбирает физико-химические методы исследования, адекватные поставленной задаче	<b>Знать:</b> теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ <b>Уметь:</b> выбирать направление экспериментального физико-химического исследования, адекватное поставленной задаче <b>Владеть:</b> навыками статистической обработки данных физико-химического эксперимента
<b>СПК-3.М.</b> Способен использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при планировании исследований, обработке и интерпретации данных в избранной области физической химии	<b>СПК-3.М.1</b> Выбирает адекватные подходы и модели при обработке данных физико-химического эксперимента	<b>Знать:</b> возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач <b>Владеть:</b> навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении физико-химических задач
	<b>СПК-3.М.2.</b> Оценивает возможности и качество программных продуктов для выполнения квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов	<b>Уметь:</b> использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов <b>Владеть:</b> навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 47 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (19 часов занятия лекционного типа, 19 часов – занятия семинарского типа, 7 часов – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 25 часов составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.  
Обучающийся должен

**Знать:** основные закономерности теории химического строения, базовые положения теории строения молекул и основы квантовой химии.

**Уметь:** формулировать и решать конкретные задачи на основе усвоенных законов и закономерностей, обсуждать основные результаты химического исследования; ориентироваться в современной литературе по основам квантовой химии и теории строения молекул.

**Владеть:** основными химическими теориями, концепциями, законами, описывающими физико-химические явления с точки зрения, молекулярного строения химических соединений.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1.	6	2	2		1		5	2		2
Тема 2.	8	2	2		1		5	4		4
Тема 3.	10	2	2		1		5	6		6
Тема 4.	10	2	2		1		5	6		6
Тема 5.	20	6	6		1		13	6		6

Тема 6.	<b>10</b>	2	3		1		<b>6</b>	5		<b>5</b>
Тема 7.	<b>6</b>	3	2		1		<b>6</b>	3		<b>3</b>
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	<b>2</b>			
<b>Итого</b>	<b>72</b>	<b>19</b>	<b>19</b>		<b>7</b>	<b>2</b>	<b>47</b>	32		<b>32</b>

Содержание тем:

Тема 1. Что такое геометрия молекул. Жесткие и нежесткие молекулы. Валентные состояния атомов в молекуле. Химическая связь. Теория Бейдера «Атомы в молекулах»

Тема 2. Основы квантовой теории строения. Коцепция Гиллеспи – отталкивание электронных пар валентной оболочки (ОЭПВО). Ограничения модели ОЭПВО

Тема 3. Длины связей и колебательные характеристики пар атомов. Геометрические параметры молекул. Изомеры. Динамические структуры.

Тема 4. Общие понятия и различия в структурной химии органических и неорганических соединений. Конформации молекул. Конформационный анализ - важный раздел стереохимии.

Тема 5. Структурные особенности разных классов соединений. Ациклические соединения. Соединения с сопряженными связями и ароматические углеводороды

Галогенпроизводные углеводородов. Кислород- и азотсодержащие ациклические соединения. Другие элементарноорганические соединения. Особенности гетероциклических соединений.

Тема 6. Экспериментальное определение структуры свободных молекул в газе.

Сравнение разных методов изучения строения молекул.

Тема 7. Общие проблемы современной структурной химии. Принципы использования современных компьютерных баз, представляющих данные о молекулярной структуре химических соединений.

#### 6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

#### 7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

- 1, Вилков Л.В., Матрюков В.С., Садова Н.И. Определение геометрического строения свободных молекул. Ленинград: Химия, 1978, 223с.
2. Ногради М. Стереохимия. Основные понятия и приложения. Москва: Мир, 1984, 392 с.
3. Компьютерная база данных MOGADOC: <http://www.uni-ulm.de/strudo/mogadoc/>
4. База данных NIST <http://www.nist.gov>

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и наборы заданий для самостоятельной работы. По теме каждого занятия указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы.

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbgmu.ru/>

#### Основная литература

1. Холанд А. Молекулы и модели. Москва: УРСС, 2011, 382 с.
2. Бердетт Дж. Химическая связь. Москва: Мир, Бином-Лаборатория знаний, 2008, 245 с.
3. Гиллесли Р., Харгиттай И. Модель отталкивания электронных пар валентной оболочки и строение молекул. Москва: Мир, 1992, 292с.
4. Цирельсон В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела, Москва: Бином, 2010, 495 с.
5. Бакстон Ш., Робертс С. Введение в стереохимию органических соединений. Москва: Мир, 2005, 311 с.

#### Дополнительная литература

1. Зоркий П. М. Структурная химия на рубеже веков. Российский Химический Журнал, 2001, т. 45, с. 2-10.
2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии, Москва: Мир, 2006, 683 с.
3. Boggs J.E., Khaikin L.S., Perevozchikov V.I., Popik M.V., Sadova N.I., Samdal S., Vilkov L.V. Some problems of nitrogen stereochemistry. In: Molecules in natural science and medicine. Part 1. Molecular Structure. Maksic Z.B., Eckert- Maksic M. (Eds) New York: Ellis Horwood, 1991, Ch.4, pp.83-102.
4. Vilkov L.V., Khaikin L.S. Stereochemistry of Compounds Containing Bonds between Si, P, S, Cl and N or O. In: Topics in Current Chemistry. Berlin: Springer, 1975, pp. 25-70.
5. Великородов А.В. Стереохимия. Стереоселективный синтез. Учебно-методическое пособие. Астрахань: Астраханский гос. университет. 2012, 124 с.
6. Соколов В.И. Введение в теоретическую стереохимию. Москва: Наука, 1982, 244 с.

**Материально-техническое обеспечение:** специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (фломастерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

в.н.с., д.х.н. Хайкин Леонид Соломонович, кафедра физической химии химического факультета МГУ,  
[lskhaikin@phys.chem.msu.ru](mailto:lskhaikin@phys.chem.msu.ru), [lskhaikin@phys.chem.msu.ru](mailto:lskhaikin@phys.chem.msu.ru), 8-495-939-26-37

с.н.с., к.х.н. Марочкин Илья Иванович, кафедра физической химии химического факультета МГУ,  
[ila00@mail.ru](mailto:ila00@mail.ru), 8-495-939-40-21

### **Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения**

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

#### **Вопросы для зачета:**

1. Какой смысл вкладывается в понятие «молекула» в современной теории строения молекул?
2. Теория Бейдера «Атомы в молекулах». Каково ее практическое значение?
3. Какие ограничения существуют в модели ОЭПВО (отталкивание электронных пар валентной оболочки)?
4. Что вкладывается в понятие «длина связи»? Какие еще структурные характеристики связей Вам известны?
5. Что такое механическая модель молекулы? Каковы ее недостатки?
6. Современное понятие о строении молекулы на основании рассмотрения поверхности потенциальной энергии молекулярной системы.
7. Какие виды изомерии Вам известны? Привести примеры.
8. Кето-енольная таутомерия. Водородные связи.
9. Что такое конформационный анализ? Основные принципы конформационного анализа.
10. Современное понятие о нежестких молекулах. Структурные особенности нежестких молекул.
11. Внутримолекулярные движения малой и большой амплитуды. Привести конкретные примеры.
12. Каковы особенности молекулярного строения соединений с сопряженными связями?
13. Какие структурные изменения в молекулах можно ожидать при замене атома азота в простейших аминах или амидах на атом фосфора? Как это скажется на химических свойствах?

14. В каких пределах меняется длина связи углерод–галоген в зависимости от природы атома галогена?
15. Принципиальные особенности строения алканов, алкенов и алкинов. Какие практические выводы можно сделать из анализа этих особенностей?
16. Понятие ароматичности с точки зрения структурной химии. Привести примеры.
17. Что такое аномерный эффект и как он отражается на величине геометрических параметров и конформационных свойствах?
18. Какими особенностями молекулярного строения должны обладать энергоемкие соединения, которые могут использоваться в качестве топлив?
19. Особенности строения молекул алициклических (карбоциклических) углеводородов
20. Привести примеры нежестких молекул с движениями большой амплитуды: заторможенным внутренним вращением, инверсией и изгибом цикла.
21. Особенности строения и свойств соединений с пептидной связью.
22. Каков разброс экспериментально определенных длин связей C-C в алициклических углеводородах?
23. Минимальные и максимальные значения длин кратных связей C=C и C≡C.
24. Минимальные и максимальные значения длин связей C-C в ароматических циклах.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач



<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ Знать: возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Уметь: выбирать направление экспериментального физико-химического исследования, адекватное поставленной задаче Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Владеть: навыками статистической обработки данных физико-химического эксперимента Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении физико-химических задач Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете