

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

### Программа дисциплины

Электронная и пространственная структура молекул М2.ДВ.1

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Чмутова Г.А.

**Рецензент(ы):**

Антипин И.С.

#### **СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_ от "\_\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 74013

Казань  
2014

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Чмутова Г.А. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Galina.Tschmutowa@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Электронная и пространственная структура молекул" является овладение современными методами изучения и анализа пространственного и электронного распределения в молекулах и других химических частицах, необходимое для прогнозирования и оценки физических свойств и реакционной способности соединений, подготовка к научно-исследовательской и педагогической деятельности, связанной с пониманием современных представлений о строении вещества.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "М2.ДВ.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Дисциплина "Электронная и пространственная структура молекул" изучается на первом курсе обучающимися по направлению 020100 "Химия", профилю "Хемоинформатика и молекулярное моделирование". Форма обучения - очная. Дисциплина относится к циклу М.2 профессиональных дисциплин, его вариативной части М1.ДВ.1 и является дисциплиной по выбору учащихся.

Дисциплина "Электронная и пространственная структура молекул" занимает важное место в основной образовательной программе магистрантов Химического института им. А.М.Бутлерова по профилю "Хемоинформатика и молекулярное моделирование", и осуществляет межпредметные связи с научными дисциплинами "Неорганическая химия", "Квантовая химия", "Физика", "Физическая химия", "Органическая химия", "Строение вещества"

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	понимание принципов и умение работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований
ПК-1 (профессиональные компетенции)	Наличием представлений о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии
ПК-3 (профессиональные компетенции)	Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии
ПК-4 (профессиональные компетенции)	Умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования
ПК-7 (профессиональные компетенции)	Умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций
ПК-6 (профессиональные компетенции)	Наличие опыта участия в научных дискуссиях

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основные теории, методы и подходы для качественных предсказаний электронного и пространственного строения органических, неорганических, металлоорганических и элементарорганических соединений,
- принципы работы методов изучения пространственной и электронной структуры соединений,
- основы квантовой теории атомов в молекуле Р. Бейдера,

2. должен уметь:

- ориентироваться в экспериментальных и теоретических методах исследования электронной структуры,
- приобретать, систематизировать и обобщать необходимую информацию из интернет-источников, периодической литературы, монографий,
- применять полученные знания на практике, использовать основные законы строения вещества для обоснованного выбора метода исследования, подбора партнеров для реакции, растворителя, катализатора, квалифицированно оценивать результаты эксперимента,
- проводить простейшие квантово-химические расчеты электронной структуры

3. должен владеть:

- теоретическими знаниями о важнейших аспектах электронной структуры (эффективные заряды на атомах, дипольные моменты, поляризуемости, электростатический потенциал, характеристики молекулярных орбиталей, топологические индексы и т.п.)

4. должен продемонстрировать способность и готовность:

реализовать знания об электронной и пространственной структуре молекул для решения практических задач.

#### **4. Структура и содержание дисциплины/ модуля**

Общая трудоемкость дисциплины составляет зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### **4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю**

##### **Тематический план дисциплины/модуля**

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура).	2	1	0	2	0	
2.	Тема 2. Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа.	2	2,3	0	4	0	
3.	Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.	2	4,5	0	4	0	тестирование
4.	Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)	2	6,7	0	4	0	устный опрос
5.	Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера	2	8-10	0	6	0	устный опрос
6.	Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.	2	11,12	0	4	0	дискуссия
7.	Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия	2	13,14	0	4	0	тестирование
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	зачет
	Итого			0	28	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

**Тема 1. Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура).**

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура). Историческое развитие представлений об электронной структуре органических молекул, современное состояние, достижения и проблемы. Экспериментальные и теоретические методы изучения электронной структуры

**Тема 2. Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа.**

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа. Координационная связь. Основная концепция для качественного предсказания структуры неорганических соединений. Концепция отталкивания валентных электронных пар и ее теоретические основы. Строение кристаллов. Методы предсказания структуры кристаллов.

**Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.**

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания. Классические (двухэлектронные двухцентровые) и многоцентровые (орбитальные) связи. Характерные особенности разных типов химической связи. "Зарядовое" распределение как результат взаимного влияния атомов, представления об эффективных зарядах на атомах, электронной и спиновой плотности, дипольный момент и поляризуемость молекулы в целом, ее фрагментов и отдельных связей, электростатический потенциал.

**Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)**

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО). Канонические, локализованные, натуральные орбитали. Молекулярно-орбитальный генезис. Характеристики граничных МО важнейших классов органических соединений.

**Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера**

**практическое занятие (6 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Теория атомов в молекулах Бейдера. Топологические характеристики электронного распределения (электронная плотность, градиент электронной плотности, лапласиан, концентрация зарядов в валентной оболочке и т.п.). Визуализация топологических характеристик. Прогнозы с их помощью реакционной способности органических соединений.

**Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.**

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры. Строение полиэдрических и каркасных структур (бораны и карбораны, металлоорганические комплексы, биоккомплексы, кластеры). Принципы изоэлектронности и изолюбальности. Правила электронного счета. Диаграммы Уолша. Стереопределяющая роль граничных молекулярных орбиталей. Строение неклассических структур и интермедиатов.

**Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия**

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Дискуссия на тему: Межмолекулярные взаимодействия Универсальные (ориентационные, индукционные, дисперсионные) и специфические (комплексы с водородной связью (Н-комплексы), с переносом заряда (КПЗ) и т.п.) межмолекулярные взаимодействия (ММВ), их природа и интенсивность. Влияние ММВ на физические свойства молекул: т. кип., т. пл., растворимость (специфическая и неспецифическая сольватация), адсорбцию, спектральные и другие характеристики; форму больших и малых молекул; тип кристаллической решетки (ионные, атомные, молекулярные кристаллы); химическую и физиологическую активность. Экспериментальные и теоретические методы исследования ММВ. Модели сольватации.

**4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
3.	Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.	2	4,5	подготовка к тестированию	12	тестирование
4.	Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)	2	6,7	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
5.	Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера	2	8-10	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
6.	Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.	2	11,12		12	дискуссия
7.	Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия	2	13,14	подготовка к тестированию	12	тестирование
	Итого				44	

## 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Преподавание дисциплины сопровождается:

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- интерактивным опросом по разделу 3,
- интерактивный опрос по разделам 5-6,
- круглым столом по теме: "QSAR"
- использованием интернет-ресурсов различных поисковых систем

## 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

**Тема 1. Строение молекул (химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура).**

**Тема 2. Строение неорганических молекул. Типы связей в них и их природа.**

**Тема 3. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.**

тестирование , примерные вопросы:

Тестирование по разделам 1-3

**Тема 4. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО)**

устный опрос , примерные вопросы:

Устный опрос понимания студентами материала по характеристикам молекулярных орбиталей.  
Темы: - Энергии МО и их роль в оценке реакционной способности химических соединений -  
Симметрии МО и их использование для оценки возможности протекания химических реакций -  
Состав молекулярных орбиталей как качественная характеристика, используемая для оценки  
предпочтительных центров химических реакций

### **Тема 5. Теория атомов в молекулах Бейдера**

устный опрос , примерные вопросы:

Устный опрос для оценки понимания различных аспектов теории "Атомы в молекулах" Р.  
Бейдера. Темы: Топологический анализ электронной плотности, Интегральные характеристики  
атомов, Критерии образования водородной связи.

### **Тема 6. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.**

дискуссия , примерные вопросы:

Круглый стол на тему "Моделирование связи структуры со свойствами техниками QSAR"

### **Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия**

тестирование , примерные вопросы:

Тестирование по разделам 4-7

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Семинарские занятия включают выполнение квантовохимических расчетов в программах Firefly  
и Gamess, а также обсуждение и презентацию материалов.

Самостоятельная работа включает следующие виды деятельности:

- изучение теоретического материала, подготовка к интерактивному опросу по материалам лекций;
- проработку теоретического материала;
- подготовка к зачету.
- поиск информации с использованием интернет-ресурсов, знакомство с новыми публикациями по теме собственных научных исследований/

Вопросы к зачету:

1. Химическое строение - первичная структура, пространственное строение, электронная структура.
2. Историческое развитие представлений об электронной структуре органических молекул, современное состояние, достижения и проблемы.
3. Типы связей в неорганических соединениях и их природа. Координационная связь. Основные концепция для качественного предсказания структуры неорганических соединений. Концепция отталкивания валентных электронных пар и ее теоретические основы.
4. Химические связи в органических (элементоорганических, металлоорганических) соединениях, их классификация и способы описания.  
Классические (двухэлектронные двухцентровые) и многоцентровые (орбитальные) связи. Характерные особенности разных типов химической связи.
5. "Зарядовое" распределение, электронная и спиновая плотности, дипольный момент и поляризуемость молекулы в целом, ее фрагментов и отдельных связей, электростатический потенциал.
6. Молекулярно-орбитальная структура (энергия, симметрия, состав, последовательность МО).
7. Теория атомов в молекулах Бейдера. Топологические характеристики электронного распределения (электронная плотность, градиент электронной плотности, лапласиан, концентрация зарядов в валентной оболочке и т.п.).
8. Взаимосвязь и взаимообусловленность характеристик электронной и пространственной структуры.

9. Строение полиэдрических и каркасных структур (бораны и карбораны, металлоорганические комплексы, биокомплексы, кластеры).
10. Принципы изоэлектронности и изоlobalьности. Правила электронного счета. Диаграммы Уолша. Строение "неклассических" структур и интермедиатов.
11. Межмолекулярные взаимодействия. Универсальные и специфические межмолекулярные взаимодействия, их природа.
12. Влияние ММВ на физические свойства молекул.
13. Экспериментальные и теоретические методы исследования ММВ. Модели сольватации.

### 7.1. Основная литература:

1. Чмутова Г.А. // Учебное пособие "Аспекты связи строение-реакционная способность" к курсу "Строение вещества". Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. С. 96.

### 7.2. Дополнительная литература:

1. В.Ф. Травень. "Электронная структура органических соединений", М., Химия, 1989.
2. А.С.Днепровский, Т.И.Темникова. Теоретические основы органической химии. Л.- Химия. 1991.
3. Р.Гиллеспи, И.Харгиттаи. "Модель отталкивания электронных пар валентной оболочки и строение молекул", М., "Мир", 1992.
4. Р.Бейдер. "Атомы в молекулах. Квантовая теория". М.: Мир, 2001. - 532 с.
5. "Реакционная способность и пути реакции" под редакцией Клопмена, М., Мир, 1977.
6. Кларк Т.// Компьютерная химия. М: Мир, 1976. - 383 с.
7. Аминова Р.М. Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии / Методическое пособие для работы на компьютере. Казанский государственный университет. - 1999. - 71 с.
8. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев. "Теория строения молекул". Изд-во "Феникс", Ростов-на Дону. 1997.
9. Л.А.Грибов, С.П.Муштакова. "Квантовая химия", М., Гардарики, 1999.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

Basis Set Exchange: A Community Database for Computational Sciences -  
<https://bse.pnl.gov/bse/portal>

Поисковая система Scirus - <http://www.Scirus.com>

Программа GAMESS и материалы сайта - <http://www.msg.ameslab.gov/games/>

Программа AIMAll - <http://aim.tkgristmill.com>

Программа Firefly - <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Электронная и пространственная структура молекул" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Компьютерный класс с программным обеспечением.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .

Автор(ы):

Чмутова Г.А. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.