

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 13.09.2023 14:59:51
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»



Утверждаю:
Руководитель ООП:
Виноградова М.Г.
«21» 09 2017 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)
МЕТОДЫ РАСЧЁТА СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ
СТРУКТУР

Направление подготовки
04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль) подготовки

Физическая химия
Для аспирантов 2 года обучения

Подготовка кадров высшей квалификации

Составитель: Виноградова М.Г.

Тверь, 2017

I. Аннотация

1. Наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

Методы расчёта свойств молекул и кристаллических структур.

2. Цель и задачи дисциплины освоение основных с идей и методов стереохимии, составляющих теоретический фундамент современной химической науки.

Задачи дисциплины

1. раскрыть основные принципы стереохимии;
2. научить аспирантов применять полученные знания для решения конкретных проблем химии;
3. повысить уровень профессиональной компетентности аспирантов посредством установления системы межпредметных связей содержания курса с содержанием профилирующих дисциплин.

3. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Методы расчёта свойств молекул и кристаллических структур» входит в раздел «Дисциплины по выбору». Дисциплина непосредственно связана с дисциплинами «Физическая химия», "Математическое моделирование в физической химии" .

4. Объем дисциплины :

___3___ зачетных единиц, ___108___ академических часов, **в том числе**

контактная работа: лекции ___4___ часов, практические занятия ___4___ часов, лабораторные работы ___0___ часов, **самостоятельная работа:** ___100___ часов.

5. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине , соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
--	--

<p>ОПК-1 обладать способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>Владеть:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. поиском информации в глобальной сети интернет; 2. современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований. <p>Уметь:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. определять симметрию (в виде точечной группы) любой молекулы и устанавливать (на языке симметрии) ее хиральность; 2. ввести валентные и невалентные взаимодействия атомов ; 3. применять полученные знания на практике. <p>Знать:</p> <p>химическое и стереохимическое строение, типы изомерии; закономерности в координации атомов; геометрическую конфигурацию молекул;</p>
<p>УК-5 обладать способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития</p>	<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - поиском информации в глобальной сети интернет; - современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - рассчитывать топологические индексы; - применять полученные знания на практике. <p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - понятие математической модели; - основные этапы математического моделирования.
<p>ПК-1 способность подбора инструментальной базы для решения научных, научно-прикладных задач</p>	<p>Владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований</p> <p>Уметь: применять методы математического моделирования</p> <p>Знать: Методы математического моделирования в физической химии</p>

6. Форма промежуточной аттестации — зачет.

7. Язык преподавания русский.

II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

1. Для аспирантов очной формы обучения

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические занятия	
1. Теория химического строения	11	1		10
2. Симметрия молекулярных систем	43	1	2	40
3. Геометрия молекул	32	1	1	30
4. Конформации молекул	22	1	1	20
ИТОГО	108	4	4	100

3. Для аспирантов заочной формы обучения (3 год обучения)

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические занятия	
1. Теория химического строения	11	1		10
2. Симметрия молекулярных систем	43	1	2	40

3. Геометрия молекул	32	1	1	30
4. Конформации молекул	22	1	1	20
ИТОГО	108	4	4	100

III. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Учебная программа

Планы и методические указания по подготовке к практическим (семинарским) занятиям, темы практических (семинарских) занятий

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы, перечень вопросов для самостоятельной работы

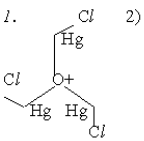
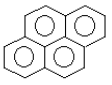
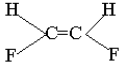
Примерная тематика контрольных работ (рефератов)

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям, контрольным работам зачёту

IV. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ОПК-1 обладать способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий

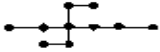
Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатель и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями,	Кейс: 1. Химическая топология изучает : <i>а)</i> Молекулы с разной геометрической конфигурацией <i>б)</i> Молекулы, отличающиеся типом химических связей <i>в)</i> Катенаны, ротаксаны, узлы, молекулярные ленты Мёбиуса и	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные

<p>применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований.</p>	<p>другие такого рода образования.</p> <p>2. Что такое квадрат Кэли (в теории групп)?</p> <p>а) Множество элементов группы б) Подмножество элементов группы, составляющих подгруппу в) Таблица умножения элементов группы</p> <p>3. Что такое стереохимическая конфигурация?</p> <p>1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы.</p> <p>2. Пространственное строение молекулы.</p> <p>3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.</p>	<p>фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла;</p> <p>• Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Уметь: определять симметрию (в виде точечной группы) любой молекулы и устанавливать (на языке симметрии) ее хиральность; ввести валентные и невалентные взаимодействия атомов; применять полученные знания на практике.</p>	<p>1. Определите точечную группу симметрии данных молекул. Какие из них являются хиральными? К какой группе симметрии (высшей, средней или низшей) они относятся?</p> <p>1.  2)  3) </p> <p>2. Рассчитайте конформационные характеристики н-Гексана (только для ТТТ, ТТГ) если (в кДж/моль) $\zeta_{cc}^g = 3,6$; $\nu_{ccr}^{gg} = 12,6$</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла;</p> <p>• Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Знать: химическое и стереохимическое</p>	<p>1. К структурной изомерии относится:</p> <p>а) оптическая изомерия; б) изомерия скелета;</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий:</p>

<p>строение, типы изомерии; закономерности в координации атомов; геометрическую конфигурацию молекул;</p>	<p>в) геометрическая изомерия; з) поворотная изомерия.</p> <p>2. Что такое химическое строение?</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Порядок (последовательность и кратность) связи атомов в молекуле. 2. Расположение атомов в пространстве. 3. Конфигурация молекулы. <p>3. Пространственные изомеры (стереоизомеры) образуют:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Молекулы, имеющие одинаковый состав, одинаковое химическое, но разное пространственное строение. 2. Молекулы с одинаковой геометрической конфигурацией (например, все тетраэдрические молекулы). 3. Оптические активные соединения. 	<p>1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»</p>
---	--	---

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции УК-5 обладать способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития

<p>Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина</p>	<p>Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)</p>	<p>Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания</p>
<p>владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и</p>	<p>Кейс:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Химическая топология изучает : <ol style="list-style-type: none"> а) Молекулы с разной геометрической конфигурацией б) Молекулы, отличающиеся типом химических связей в) Катенаны, ротаксаны, узлы, молекулярные ленты Мёбиуса и другие такого рода образования. 2. Что такое квадрат Кэли (в теории групп)? <ol style="list-style-type: none"> а) Множество элементов группы 	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла;</p>

<p>сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований.</p>	<p>б) Подмножество элементов группы, составляющих подгруппу в) Таблица умножения элементов группы</p> <p>3. Что такое стереохимическая конфигурация?</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы. 2. Пространственное строение молекулы. 3. Равновесная конфигурация ядерного скелета. 	<p>Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - рассчитывать топологические индексы; - применять полученные знания на практике. 	<p>Для графа  построить матрицу D и найти индексы ρ_3 и W.</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Знать: - понятие математической модели; - основные этапы математического моделирования.</p>	<p>Что такое математическая модель</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Приближенное описание какого-либо объекта (явления, процесса) в терминах математики (вместе с граничными и начальными условиями). 2. Определенное математическое выражение, описывающее изучаемый процесс или явление. 3. Исходные предпосылки в постановке задачи. 	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>

	<p>Общая погрешность решения задачи складывается из:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Погрешности математической модели; 2. Погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель; 3. Погрешности математической модели + погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель, + вычислительной погрешности. <p>3. Схема Фаянса для алканов имеет вид</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $P_{C_nH_{2n+2}} = (n-1)pc-c + (2n+2)pc-n .$ 2. $P_{C_nH_{2n+2}} = (n-1)pc-c + (2n+2)pn .$ 3. $P_{C_nH_{2n+2}} = (n)pc + (2n+2)pn .$ 	
--	---	--

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-1 способность подбора инструментальной базы для решения научных, научно-прикладных задач

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
<p>Владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. К каким группам симметрии относятся молекулы, имеющие собственные дипольные моменты? <ol style="list-style-type: none"> 1. C_n , C_{nv} . 2. D_n , D_{nh} , D_{nd} 3. T_d , O_h , I_h 2. Центр симметрии есть в: <ol style="list-style-type: none"> а) треугольнике; б) пятиугольнике; в) шестиугольнике; г) тетраэдре. 3. Элементы симметрии 	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 2 балла; • Имеется верное решение только части задания– 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>

<p>научных исследований</p>	<p>конечных фигур – это: а) ось симметрии, плоскость и центр симметрии, зеркально-поворотная ось; б) поворот, отражение; в) винтовые оси; г) плоскости скользящего отражения.</p>	
<p>Уметь: применять методы математического моделирования</p>	<p>общая погрешность решения задачи складывается из: 1. Погрешности математической модели; 2. Погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель; 3. Погрешности математической модели + погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель, + вычислительной погрешности.</p> <p>2. Коэффициент диффузии при моделировании методом молекулярной динамики может быть рассчитан из уравнения Эйнштейна-Смолохувского и как интеграл от автокорреляционной функции скорости. Почему обычно использую первый способ и как это реализуется.</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Знать: Методы</p>	<p>1. Наиболее</p>	<p>Правильно выбран</p>

<p>математического моделирования физической химии</p>	<p>в распространённым программным продуктом для визуализации молекулярных структур является:</p> <p>11.RasMol 12.Origin 13.HyperChem 14.MolMol</p> <p>2.Укажите правильное основное предназначение программ из пакета MS Office (например а-2)</p> <p>а. Word б. Excel в. Access г. Power Point д. Outlook е. Publisher</p> <p>д) настольная издательская система, предназначена для создания профессионально оформленных публикаций; е) система управления базами данных, предназначена для организации работы с большими объемами данных; ж) табличный процессор, предназначен для обработки табличных данных и выполнения сложных вычислений; з) текстовый процессор, предназначен для создания и редактирования текстовых документов; и) система подготовки электронных презентаций, предназначена для подготовки и проведения презентаций; к) менеджер персональной информации, предназначен для обеспечения</p>	<p>вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»</p>
---	---	--

	нифицированного доступа корпоративной информации	
--	--	--

V. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) Основная литература:

1. Камышов В. М. Строение вещества / В. М. Камышов; Камышов В.М., Мирошникова Е.Г., Татауров В.П. - Москва : Лань, 2017. – Электронный ресурс. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/9000>
2. Новиков А.Ф. Строение вещества. Санкт-Петербург, 2013 Режим доступа: <http://books.ifmo.ru/file/pdf/1022.pdf>

б) Дополнительная литература:

3. Папулов Ю. Г. Строение молекул. Теория и методы расчета [Электронный ресурс] : [для студентов химических направлений и специальностей] / Папулов Юрий Григорьевич; ФГБОУ ВПО "Твер. гос. ун-т". - Тверь : Тверской государственный университет, 2013. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM) ; 12 см. - 100.00. Экз.: 2, из них: Фил3-2; Режим доступа: http://texts.lib.tversu.ru/texts/stroenie_molekul_teoriya_i_metody_rascheta_2013/Start.html
4. Строение вещества. Строение кристаллов. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана (Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана), 2010. - "Рекомендовано Научно-методическим советом МГТУ им. Н.Э. Баумана в качестве учебного пособия". – Электронный ресурс. – Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=52473

VI. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. <http://www.xumuk.ru/>
2. <http://www.studarihiv.ru/dir/cat16/subj19/file932/view932.html>
3. <http://www.alhimik.ru/teleclass/glava3/gl-3-1.shtml>
4. <http://www.ostu.ru/personal/sim/Concept/DAT/planlex.html>
5. http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html
6. <http://ximozal.ucoz.ru/photo/1>

VII. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Учебная программа

1. ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ

Основные положения теории химического строения.

Химическая топология. Координация атомов.

Хиральность. Стереохимическая (абсолютная) конфигурация.

Конформация. Пространственная изомерия.

Внутримолекулярные взаимодействия. Связь свойств веществ и строением молекул.

2. СИММЕТРИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Элементы и операции симметрии конечных фигур. Группы симметрии (точечные группы). Элементы теории групп. Представления групп и характеры. Систематика квантовых состояний молекул. Симметрия АО и МО.

3. ГЕОМЕТРИЯ МОЛЕКУЛ

Понятие геометрической конфигурации. Геометрические параметры: межъядерные расстояния (длины связей), валентные и азимутальные углы. Закономерности в геометрической конфигурации.

4. КОНФОРМАЦИИ МОЛЕКУЛ

Конформации алканов: этана, пропана, *n*-бутана и т.д. Вид и число конформеров, их симметрия, статистических вес, энергетические и энтропийные различия, конформационная свободная энергия, содержание конформеров в поворотно-изомерной смеси

Конформации моноциклов. Малые циклы (3-4 звена), обычные (5-7 звеньев), средние (8-11 звеньев), большие (≥ 12 звеньев). Иверсия циклов. Псевдповращение. Конформации циклогексана. Бициклические и полициклические соединения.

Планы и методические указания по подготовке к практическим (семинарским) занятиям

Планы практических занятий и методические рекомендации по подготовке к ним разработаны в соответствии с программой дисциплины «Методы расчёта свойств молекул и кристаллических структур.» и предназначены для проведения практических занятий и для самостоятельной подготовки студентов.

Практические занятия по дисциплине «Методы расчёта свойств молекул и кристаллических структур.» являются одной из важнейших форм обучения и проводятся с целью углубления и закрепления знаний, привития навыков поиска, обобщения и изложения материала.

Семинарские занятия могут проводиться следующими методами: «дискуссии», «деловых игр», упражнения и др.

Конкретный метод проведения каждого семинарского занятия накануне определяет преподаватель.

1. Химическое и стереохимическое строение

Стереохимическая конфигурация и конформация. Основные типы изомерии.

2. *Симметрия молекул.*

Определение точечных групп симметрии (на моделях).

3. *Геометрия молекул*

Внутреннее вращение. Кривые внутреннего вращения (основные типы), их построение.

5. Конформации молекул

Определение конформаций алканов.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа по дисциплине «Методы расчёта свойств молекул и кристаллических структур.» проводится с целью углубления и закрепления полученных в ходе лекционных занятий знаний и приобретение навыков пользования рекомендованной литературой, навыков научного исследования.

Самостоятельная работа начинается с работы над лекционным материалом. Она включает конспектирование лекций и последующую работу над ними. При конспектировании лекции рекомендуется на каждой странице оставлять поля для последующих записей в дополнение к конспекту.

При работе над текстом лекции студенту следует обратить особое внимание на проблемные вопросы, поставленные преподавателем при чтении лекции, а так же на его задание и рекомендации.

Перечень вопросов для самостоятельной работы

1. Теория химического строения

- 1.1. Химическая топология. Координация атомов.
- 1.2. Стереохимическая (абсолютная) конфигурация.
- 1.3. Связь свойств веществ и строением молекул

2. Симметрия молекулярных систем

- 2.1. Элементы теории групп.
- 2.2. Представления групп и характеры.
- 2.3. Симметрия АО и МО.

3. Геометрия молекул

- 3.1. Закономерности в геометрической конфигурации.
- 3.2. Интерпретация геометрического строения на основе теории МО ЛКАО.

4. Конформации молекул

- 4.1. Конформеры ациклических соединений (алканов).

4.2 Конформации моноциклов (циклопропан, циклопентан, циклопентан).

4.3 Конформации циклогексана.

Примерная тематика контрольных работ (рефератов)

Представленный реферат должен иметь титульный лист, план (содержание, оглавление), изложение (в соответствии с планом), заключение (выводы), список использованной литературы. На титульном листе указывается университет, факультет и кафедра, тема реферата и название дисциплины; учёное звание, фамилия, имя и отчество преподавателя; фамилия, имя и отчество студента, его группа. Объём реферата – 12-18 страниц.

1. Химическая топология
2. Топологические индексы
3. Химическое строение и биологическая активность.
4. Строение молекул и лекарственное действие.
5. Теория химического строения
6. Творческие портреты выдающихся учёных. (А.М. Бутлеров)
7. Творческие портреты выдающихся учёных. (Э. Франкланд)
8. Творческие портреты выдающихся учёных. (А. Кекуле)
9. Творческие портреты выдающихся учёных. (Ф. Вёлер)
10. Физические основы учения о строении молекул
11. Симметрия как общий вопрос естествознания
12. Симметрия молекул.
13. Симметрия и асимметрия в живой природе.
14. Геометрия молекул
15. Пространственная изомерия
16. Энтальпия образования и химическое строение.
17. Энтальпия атомизации и средние энергии связей.
18. Электрические свойства
19. Магнитные свойства.
20. Уровни энергии и переходы между ними.
21. Молекулярные спектры
22. Структурные методы и оптическая спектроскопия.
23. Творческие портреты выдающихся учёных. (Н. Бор)
24. Творческие портреты выдающихся учёных. (Л. де Бройль)
25. Творческие портреты выдающихся учёных. (В. Гейзенберг)
26. Творческие портреты выдающихся учёных. (Э. Шредингер)
27. Творческие портреты выдающихся учёных. (П.А. Дирак)
28. Творческие портреты выдающихся учёных. (Р. Оппенгеймер)
29. Межмолекулярное взаимодействие
30. Симметрия кристаллов.
31. Молекула как система материальных точек.
32. Становление квантовой механики
33. Квантовая механика простых систем
34. Внутримолекулярные взаимодействия

35. Внутреннее вращение молекул
36. Развитие стереохимии
37. Пространственное строение полипептидов и белков
38. Стереои́зомерия аминокислот

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям, контрольным работам зачёту

Самостоятельное изучение дисциплины целесообразно начинать, ознакомившись с программой дисциплины и требованиями к минимуму содержания, знаниям и умениям по данной дисциплине. Уяснив общую структуру курса, ознакомившись с зачетными вопросами, можно переходить к его поэтапному изучению, привлекая для этого материалы лекций и рекомендованную учебную литературу.

Изучая дисциплину, необходимо добиться полного усвоения ее теоретических основ, научиться применять теоретические знания для решения практических задач. Содержание незнакомых терминов, встретившихся в процессе освоения учебного материала, можно выяснить при помощи справочной литературы. Более сложные вопросы уточняются на консультациях с преподавателем кафедры.

Зачет по дисциплине включает:

- устный ответ на вопросы и выполнение контрольного задания;

При ответе на вопросы следует четко знать определения, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами и графиками.

При оценке устного ответа на вопросы принимается во внимание:

1. полнота, глубина освещения вопроса, аргументированность изложения материала;
2. умение связывать теорию с практикой;
3. культура речи.

В ходе зачета преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.

Пример построения варианта контрольного задания

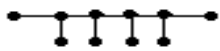
Задание 1

Хиральность – это:

- а) свойство объекта не совмещаться со своим зеркальным изображением;
- б) нарушение симметрии;
- в) свойство объекта быть тождественным своему зеркальному изображению;

г) асимметрия

Задание 2



Для графа построить матрицу A и найти индексы p_3 и M_1 .

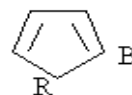
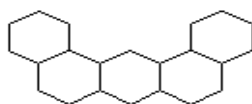
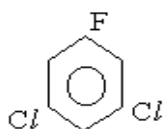
Задание 3

Изобразите изомеры октана (18)

Задание 4

Определите точечную группу симметрии данных молекул. Какие из них являются хиральными? К какой группе симметрии (высшей, средней или низшей) они относятся?

1)



Банк контрольных вопросов и заданий по учебной дисциплине

1. Формирование представлений о строении молекул: атомно-молекулярное учение, химическая теория строения, физическая (квантовомеханическая) теория молекул.
2. Основные черты современного учения о строении молекул: предмет учения, основные теории, строение молекул и свойства, экспериментальные и расчётные методы.
3. Источники научных сведений о строении молекул.
4. Топологические (теоретико-графовые) представления в классической теории химического строения.
5. Аддитивные методы расчёта в химии .

Банк контрольных вопросов и заданий по учебной дисциплине

6. Формирование представлений о строении молекул: атомно-молекулярное учение, химическая теория строения, физическая (квантовомеханическая) теория молекул.
7. Основные черты современного учения о строении молекул: предмет учения, основные теории, строение молекул и свойства, экспериментальные и расчётные методы.
8. Источники научных сведений о строении молекул.
9. Классическая теория валентности.
10. Топологические (теоретико-графовые) представления в классической теории химического строения.
11. Аддитивные методы расчёта в химии .

12. Математический формализм квантовой механики (линейные самосопряжённые операторы в гильбертовом пространстве).
13. Основные постулаты квантовой механики.
14. Угловые моменты. Векторная модель.
15. Гармонический осциллятор и жёсткий ротатор (постановка задачи, результаты решения).
16. Задача об атоме водорода (постановка задачи, результаты решения).
17. Принцип построения периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева (формирование электронных оболочек, природа периодичности, смысл деления групп на подгруппы).
18. Периодическая система изотопов (атомных ядер).
19. Одноэлектронное приближение. Теория ССП Хартри-Фока и Рутаана.
20. Вычислительные методы квантовой химии.
21. Хиральность в химии .
22. Инверсионно-перестановочные группы (группы молекулярной симметрии).
23. Закономерности в потенциальных барьерах внутреннего вращения .
24. Конформации открытых цепей (алканов).
25. Конформации моноциклов.
26. Конформации би- и полициклических соединений.
27. Силы межмолекулярного взаимодействия.
28. Аморфные вещества.
29. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.
30. Симметрия кристаллов.
31. Типы кристаллов.

Вопросы для подготовки к зачету

1. Химическое строение. Структурная изомерия.
2. Симметрия молекул (точечные группы).
3. Хиральность.
4. Стереохимическое строение. Конфигурация и конформация.
5. Координация атомов около центрального атома (иона). Геометрия молекул вида $AХ_n$ ($n = 2, 3, 4, \dots 9$). Валентные состояния атомов.
4. Конфигурационная (оптическая и геометрическая) изомерия.
5. Конформационная (поворотная) изомерия.
6. Химическая и стереохимическая топология. Катенаны, ротаксаны, узлы. Молекулярный лист Мебиуса.
11. Потенциальная поверхность (кривая) молекулы. Критерий существования химической частицы как единого связного целого.
15. Основные понятия теории групп и теории представлений групп.
16. Симметрия атомных, групповых, молекулярных орбиталей.
 1. Межмолекулярное взаимодействие (основные составляющие).
 2. Строение конденсированных фаз. Жидкости и аморфные вещества. Мезофазы.
 3. Кристаллы.

VIII. Перечень педагогических и информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (по необходимости)

В процессе освоения дисциплины используются следующие образовательные технологии, способы и методы формирования компетенций: проблемная лекция, деловая учебная игра, упражнения.

IX. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Учебная доска.
2. Мультимедийный проектор,
3. Экран,
4. Компьютер.

X. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Дата и протокол заседания кафедры, утвердившего изменения
1.	V. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	Обновлён список основной и дополнительной литературы	Протокол № 11 от 18.05.2017
2.			