

УТВЕРЖДАЮ
Первый проректор, проректор по
УР

_____ А.Е. Рудин
«04» ____ 04 ____ 2023 года

Рабочая программа дисциплины

Б1.О.19 Строение вещества

Учебный план: 2024-2025 04.05.01 ИПХЭ Медицинская химия ОО №3-1-155.plx

Кафедра: **44** Теоретической и прикладной химии

Направление подготовки:
(специальность) 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: специализация "Медицинская химия"
(специализация)

Уровень образования: специалитет

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоё мкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
	Лекции	Практ. занятия				
6	УП	34	17	20,75	0,25	Зачет
	РПД	34	17	20,75	0,25	
Итого	УП	34	17	20,75	0,25	
	РПД	34	17	20,75	0,25	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденным приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652

Составитель (и):

кандидат химических наук, Доцент

Лапатын Николай
Анатольевич

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии

Новоселов Николай
Петрович

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Новоселов Николай
Петрович

Методический отдел:

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: формирование компетенций студентов в области теоретических представлений о строении вещества, позволяющей им успешно решать задачи профессиональной деятельности по оптимизации существующих и разработке новых технологий получения и анализа продукции химических производств

1.2 Задачи дисциплины:

Познакомить с системой теоретических знаний и представлений о строении молекул и веществ, о связи физических и химических свойств молекул и веществ с их строением;

Научить применять теоретические представления, теоретические и полуэмпирические модели строения веществ для объяснения физико-химических явлений и их прогнозирования;

Раскрыть суть расчётно-теоретических методов исследования строения молекул и веществ.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Общая и неорганическая химия

Физика

Математика

Аналитическая химия

Органическая химия

Химия гетероциклических соединений

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ОПК-3: Способен применять расчётно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения
Знать: теоретические представления о строении молекул, о связи физических и химических свойств молекул с их строением для моделирования структуры молекул с использованием специализированных программных продуктов
Уметь: применять методы расчета молекулярных характеристик или свойств вещества с привлечением экспериментальных данных для объяснения физико-химических явлений и их прогнозирования
Владеть: навыками использования специализированных программных продуктов для расчётно-теоретических методов исследования строения и моделирования молекул
ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач
Знать: основные параметры и закономерности геометрической конфигурации молекулы, основы квантовой механики в приложении к молекулярным системам
Уметь: описывать структуру и динамику молекул в классической механике
Владеть: навыками расчетов электрических и магнитных свойства молекул

3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)			
Раздел 1. Основы теории строения атома	6					
Тема 1. Корпускулярно-волновой дуализм микрочастиц. Уравнение Шредингера. Решение уравнения Шредингера для атома водорода. Квантовые числа. Атомные орбитали атома водорода. Многоэлектронные атомы. Электронные конфигурации. Символы атомных термов. Практическое занятие: «Многоэлектронные атомы. Электронные конфигурации. Символы атомных термов. Выполнение упражнений».		1	1	5	ГД	О
Тема 2. Многоэлектронные атомы. Электронные конфигурации. Символы атомных термов.		1				
Раздел 2. Многоатомные частицы						
Тема 3. Молекулы. Потенциальная поверхность. Элементы теории симметрии молекул. Практическое занятие: «Выполнение упражнений по теме».		1	1			О
Тема 4. Теоретические методы, применяемые для изучения строения молекул.		1			ГД	
Раздел 3. Теории химической связи						
Тема 5. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей. Приближенное описание молекулярных орбиталей гомо- и гетероядерных молекул в методе ЛКАО МО. Ковалентная связь. Молекулярные термы. Практическое занятие: «Выполнение упражнений по теме».		2	2			
Тема 6. Принципы расчета молекулярных орбиталей. Метод Хюккеля. Свойства, выведенные из волновых функций. Расширенный метод Хюккеля. Метод частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием. Практическое занятие: "Выполнение упражнений по теме".		2	2			О
Тема 7. Ионная связь. Химическая связь в комплексных соединениях. Теория поля лигандов. Практическое занятие: "Решение задач и выполнение упражнений по теме"		2	2		ГД	
Раздел 4. Молекулярные взаимодействия						
Тема 8. Межмолекулярные взаимодействия: ориентационные, дисперсионные (эффект Лондона), индукционные (эффект Дебая) . Силы Ван- дер-Ваальса. Другие виды неспецифического взаимодействия. Практическое занятие: "Выполнение упражнений по теме"	1	1	3,75	ГД	О	

Тема 9. Водородная связь.	1				
Раздел 5. Спектроскопическое исследование энергетического состояния и строения молекул					
Тема 10. Природа излучения. Энергии, соответствующие различным видам излучения. Энергетические переходы в атомах и молекулах. Правила отбора. Химические процессы, влияющие на естественную ширину спектральных линий. Практическое занятие: "Выполнение упражнений по теме".	4	1			О
Тема 11. Электронная абсорбционная спектроскопия. Введение. Отнесение переходов. Интенсивность электронных переходов. Применения. Практическое занятие: "Выполнение упражнений по теме".	2	2		ИЛ	
Тема 12. Колебательная и вращательная спектроскопии: инфракрасная, комбинационного рассеяния и микроволновая. Практическое занятие: "Выполнение упражнений по теме. Анализ спектров".	2	1			
Раздел 6. Строение кристаллических макроскопических тел (основы химии твердого тела)					
Тема 13. Введение. Исследование кристаллической структуры. Некоторые общие свойства кристаллов.	2				
Тема 14. Типы кристаллических решеток кристаллов. Реальные кристаллы, дефекты кристаллической решетки. Практическое занятие: "Выполнение упражнений".	2	1		ГД	О
Тема 15. Металлы и их сплавы. Полупроводники. Практическое занятие: "Выполнение упражнений".	2	1			
Тема 16. Жидкие кристаллы. Практическое занятие: "Выполнение упражнений".	2	1			
Раздел 7. Структура некристаллических макроскопических тел (жидкости и полимеры, композитные материалы)					
Тема 17. Структура жидкостей.	2		4		
Тема 18. Стекло. Структура стеклообразных веществ. Металлические стекла. Стеклокерамика.	2		4		О
Тема 19. Макромолекулы. Структура органических полимеров. Практическое занятие: "Выполнение упражнений".	1	1	4	ГД	
Тема 20. Композитные материалы.	1			ИЛ	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)	34	17	20,75		
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)	0,25				
Всего контактная работа и СР по дисциплине	51,25		20,75		

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ОПК-3	Описывает методы математического анализа. Применяет элементы квантовой- химических расчетов при описании строения молекул и вещества в конденсированном состоянии. Предлагает различные методы исследования строения молекул.	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания
ОПК-4	Интерпретирует данные, полученные в ходе физико-математического анализа исследуем систем. Применяет методы математического анализа для описания полученных данных. Анализирует полученные данные.	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся показывает всестороннее, систематическое и глубокое знание основного и дополнительного учебного материала, правильно решает практическое задание; демонстрирует критический, оригинальный подход к материалу.	
Не зачтено	Обучающийся показывает незнание основного учебного материала, допускает принципиальные ошибки при ответе, плохо ориентируется в учебно - методической литературе.	

5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 6	
1	Строение вещества. Различные аспекты термина -строение молекул.
2	Основные положения классической теории химического строения.
3	Физические основы учения о строении молекул. Механическая модель.
4	Кинетическая концепция образования молекул.
5	Квантово-химическое описание молекулярных систем. Уравнение Шредингера.
6	Ковалентная связь. Метод валентных связей.
7	Метод молекулярных орбиталей. Общая характеристика и правила построения.
8	Химическая связь в координационных соединениях и типы комплексных соединений.
9	Метод молекулярных орбиталей в описании строения комплексных соединений. Правило 18 электронов.
10	Вибронные взаимодействия. Эффект Яна-Теллера.
11	Модель локализованных электронных пар Гиллеспи-Найхолма. Примеры.
12	Химическая связь и фазовое состояние веществ. Межмолекулярное взаимодействие. Водородная связь
13	Основные понятия теории симметрии. Операции симметрии. 14. Точечные группы симметрии. Правила определения симметрии молекул и их ориентации в декартовой системе координат.
14	Неприводимые представления и таблицы характеров. 16. Симметрия физических свойств. Зависимость физико-химических свойств молекул от структуры.
15	Общая характеристика экспериментальных методов определения электронной структуры молекул (фотоэлектронная, рентгеноэлектронная и рентгеновская спектроскопия).
16	Основы колебательной спектроскопии. Симметрия нормальных колебаний, методы её определения.

17	Анализ молекулярных колебаний с помощью теории групп.
18	Предсказание колебательных спектров молекул (пример).
19	Правила отбора КР- и ИК-спектров.
20	Принцип сохранения орбитальной симметрии. Правило Вудворда-Гофмана.
21	Определение и классификация межмолекулярных взаимодействий.
22	Структурная классификация конденсированных фаз.
23	Молекулярные кристаллы.
24	Жидкие кристаллы: определение, классификация, строение и свойства.
25	Структура жидкостей и аморфных тел. Экспериментальные методы определения.
26	Электронное строение металлов, ионных и ковалентных кристаллических веществ. Зонная теория.
27	Полупроводники и диэлектрики.
28	Ширина запрещенной зоны и подвижность носителей заряда.
29	Физические свойства кристаллов. Принцип симметрии Кюри и правило Неймана.
30	Структурная организация наноразмерных частиц и образований

5.2.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрено

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. Сопоставить строение и некоторые свойства комплексных соединений $K_4[FeCl_4]$ и $K_3[Fe(CN)_6]$: - электронные конфигурации центральных ионов, координационные многогранники, распределение электронов по d-орбиталям этих ионов с учетом (если необходимо силы лигандов) и орбитали, заполняющиеся лигандами, - эффективные магнитные моменты, энергию стабилизации кристаллическим полем, термодинамическую и кинетическую устойчивость.

2. Для каждой молекулярной частицы: BeH_2 , BH_2 , BF_3 , NF_3 , ClF_3 методом Уолша предскажите геометрию ее основного электронного состояния. Предскажите геометрию первого возбужденного состояния частицы. Изменилась ли геометрия частицы при ее переводе в первое возбужденное состояние? Предскажите геометрию однозарядного катиона, образованного из молекулы в основном состоянии. Изменилась ли при этом геометрия частицы?

3. На потертой этикетке склянки с раствором, имеющим запах спирта, видна надпись «...70%». Для определения вещества в склянке измерили плотность раствора и его показатель преломления и получили следующие данные: $\rho = 0,868 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$; $n_D = 1,3646$. Были измерены также показатель преломления n_D и плотность ρ воды: $n_D = 1,3330$; $\rho = 0,998 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}$. Все измерения проводили при 20°C . Напишите структурную формулу исследуемого вещества.

4. Во вращательном спектре поглощения хлороводорода в дальней ИК-области спектра наблюдается несколько линий поглощения. По разности волновых чисел соседних линий поглощения, равной ($\Delta \nu$) $21,35 \text{ см}^{-1}$, определите момент инерции и равновесное межъядерное расстояние в молекуле. На основании равновесного межъядерного расстояния в молекуле хлороводорода определите волновые числа первых десяти линий во вращательном спектре поглощения, считая частицу жестким ротатором

5. Описать электронное строение молекул CO и CN с позиций методов ВС и МО. Какая из молекул характеризуется большей кратностью связи?

5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

Выполнение заданий на практических занятиях, посещение занятий

5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная

Письменная

Компьютерное тестирование

Иная

5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

- Возможность пользоваться справочными таблицами, калькулятором;
- Время на подготовку ответа по билету 45 минут.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Бурмистрова, Н. А., Пожаров, М. В., Смотров, М. П.	Квантовая механика и квантовая химия	Саратов: Издательство Саратовского университета	2020	http://www.iprbookshop.ru/106265.html

Корнеева, В. В., Корнеева, А. Н., Небольсин, В. А.	Строение вещества	Воронеж: Воронежский государственный технический университет, ЭБС АСВ	2019	http://www.iprbookshop.ru/93295.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Лисневская, И. В.	Строение вещества	Ростов-на-Дону, Таганрог: Издательство Южного федерального университета	2021	https://www.iprbooks.hop.ru/121936.html

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

- Реферативно-поисковая база данных Reaxys (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scopus (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scifinder (Chemical Abstracts Service)
- Библиометрическая база данных Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.)
- База данных полнотекстовых научных журналов JSTOR.
- Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки (ЭБД РГБ)
- Электронные ресурсы российской научной библиотеки eLibrary.ru
- Электронные ресурсы издательства American Chemical Society (ACS)
- Электронные ресурсы издательства Annual Reviews
- Электронные ресурсы Freedom Collection издательства Elsevier
- Электронные ресурсы издательства The Royal Society of Chemistry (RSC) - Электронные ресурсы издательства Wiley

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

- Microsoft Windows
- MicrosoftOfficeProfessional
- 1С-Битрикс: Внутренний портал учебного заведения

6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Лабораторные занятия со студентами проводятся в специализированных помещениях кафедры, оборудованных химической посудой, химическими реактивами, измерительными приборами (термометры, рН-метры, весы), дистиллятором, сушильными шкафами, муфельной печью, компьютером.

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска