

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.О.03.02.05 ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Строение вещества

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

04.03.01.32 Физическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2022

Красноярск 2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

канд.хим.наук, доцент, Томилин Ф.Н.

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Цель изучения дисциплины – получение студентами базовых сведений по строению вещества, необходимых для освоения специальных дисциплин, а по окончании обучения в вузе – для грамотной, эффективной работы в сфере профессиональной деятельности.

1.2 Задачи изучения дисциплины

Курс «Строение вещества» относится к базовой части (общепрофессиональные дисциплины) учебного цикла. Задачами курса являются формирование у студентов современного и полного представления об электронном строении молекул и атомов, основанного на теории групп.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
ОПК-1: Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	
ОПК-1.3: Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	
ОПК-3: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	
ОПК-3.1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	
ОПК-3.2: Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	
ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	

ОПК-4.2: Обрабатывает данные с использованием стандартных способов	
аппроксимации численных характеристик	
ОПК-5: Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности	
ОПК-5.1: Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	
УК-1: Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	
УК-1.1: Осуществляет поиск, анализ информации для решения поставленной задачи	

1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад. час)	е
		1
Контактная работа с преподавателем:	2 (72)	
занятия лекционного типа	1 (36)	
практические занятия	1 (36)	
Самостоятельная работа обучающихся:	1 (36)	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

		Контактная работа, ак. час.							
№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
				Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
		Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
1. Введение и математический аппарат квантовой химии									
	1. Введение в теорию строения вещества. Содержание понятий “строение вещества” и “структура вещества”. Различные аспекты термина “строение молекул”: топологический, геометрический, электронный и др. Упорядоченные и неупорядоченные структуры конденсированных фаз. Общий обзор методов экспериментального и теоретического изучения строения молекул и строения веществ.	3							
	2. Операторы. Наблюдаемые. Среднее значение и дисперсия. Плотность вероятности. Соотношение неопределенностей. Представление наблюдаемых физических величин: операторы координаты, импульса, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии, гамильтониан. Задача на собственные значения. Эрмитовы операторы и их собственные значения			6					

<p>3. Основы классической теории химического строения. Основные положения классической теории химического строения. Молекулярные модели различного уровня в современной теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Величины, определяющие геометрическую конфигурацию молекулы: межъядерные расстояния, валентные углы, двугранные и торсионные углы. Внутреннее вращение. Конформации молекул.</p>	3							
<p>4. Электрон в кулоновском поле: атом водорода. Разделение переменных. Радиальные и угловые функции. Орбитали. Водородоподобные атомы. Понятие об одноэлектронных состояниях. Вырождение одноэлектронных состояний</p>			5					

<p>5. Физические основы учения о строении молекул. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Метод молекулярной механики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Квантовые состояния молекулы (электронные, колебательные, вращательные). Потенциальные поверхности электронных состояний молекул. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры. Колебания молекул. Среднеквадратичные смещения атомов (амплитуды колебаний). Нормальные колебания, частоты нормальных колебаний и частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой. Вращение молекул как целого. Различные типы молекулярных волчков. Электронное строение молекул. Молекулярные орбитали. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей.</p>	6							
<p>6. Элементы и операции симметрии. Основные точечные группы симметрии. Представления точечных групп, неприводимые представления. Двойные группы. Построение таблиц характеров. Учет симметрии при классификации орбиталей. Прямое произведение представлений. Правила отбора для электронных переходов. Применение теории симметрии в колебательной спектроскопии. Решение задач.</p>			1					

<p>7. Симметрия молекулярных систем. Элементы и операции симметрии ядерной конфигурации молекулы. Точечные группы симметрии. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение (дипольный момент и моменты инерции, форма нормальных колебаний, вырождение состояний, сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях и т.п.). Орбитальные корреляционные диаграммы.</p>	6							
<p>8. Электрические и магнитные свойства. Постоянные внешние электрическое и магнитное поля. Дипольный момент и поляризуемость молекул, магнитный момент и магнитная восприимчивость молекул. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные (ЭПР и ЯМР) методы исследования строения молекул. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.</p>	3							
<p>9. Углубленная проработка лекционного материала и разделов, не пройденных на аудиторных занятиях.</p>						9		

10. Квантовая система в переменном электромагнитном поле. Временная теория возмущений. Переходы под влиянием излучения. Решение задач на правила отбора.			6					
11. Самостоятельное решение задач по темам, заданным преподавателем							9	
12. Выполнение, оформление и подготовка к защите реферата. Тема реферата предлагается студентом самостоятельно и должна соответствовать предложенному направлению.							8	
2. Методики расчета молекулярных систем								
1. Межмолекулярные взаимодействия. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства веществ. Молекулярные комплексы (π -комплексы и др.). Кластеры атомов и молекул. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Водородная связь.	3							
2. Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Жидкие кристаллы и другие мезофазы. Аморфные вещества. Жидкости. Особенности строения полимерных фаз.	3							
3. Трансляционная симметрия и кристаллическая решетка, типы решеток. Элементарная ячейка кристалла (параллелепипед повторяемости), параметры элементарной ячейки. Индексы направлений и плоскостей в решетке. Кристаллографические и некристаллографические операции симметрии. Взаимодействие закрытых элементов симметрии и трансляций, примеры.			6					

4. Строение кристаллов. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, понятие о пространственных группах симметрии кристаллов. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, слоистые и каркасные структуры. Динамика кристаллической решетки. Фононный спектр. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы.	3							
5. Сингонии кристаллов, их голоэдрические группы и параметры элементарной ячейки. Типы центрировки и решетки Браве. Кристаллографические точечные группы.			6					
6. Зонная теория. Периодические граничные условия. Разложение волновых функций по плоским волнам. Зонная картина элек-тронного строения. Функции Блоха. Функции Ванье. Проводники и изоляторы. Нарушения симметрии. Электронная структура вблизи поверхности. Особенности расчетов полубесконечных кристаллов.	3							
7. Поверхность конденсированных фаз. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей. Структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.	3							
8. Углубленная проработка лекционного материала и разделов, не пройденных на аудиторных занятиях.							2	

9. Основные понятия о состоянии электронов в свободных атомах. Обобществление электронов в кристалле. Энергетический спектр электронов в кристалле (энергетические зоны). Зависимость энергии электрона от волнового вектора.			6					
10. Самостоятельное решение задач по темам, заданным преподавателем							4	
11. Выполнение, оформление и подготовка к защите реферата. Тема реферата предлагается студентом самостоятельно и должна соответствовать предложенному направлению.							4	

<p>12. Оценка «отлично» ставится за полное соответствие ответа утвержденным критериям, при этом студентом возможно допустить несколько незначительных ошибок, которые после замечания экзаменатора самостоятельно исправляет студент.</p> <p>Оценка «хорошо» ставится за ответ, удовлетворяющий тем же требованиям, что и для оценки «отлично», но при этом допускаются студентом несколько незначительных ошибок.</p> <p>Необходимыми условиями для выставления оценок «отлично» или «хорошо» является полный ответ на дополнительные вопросы по курсу и понимание основных проблем курса.</p> <p>Оценка «удовлетворительно» ставится за слабые знания экзаменационного материала, но недостатки в подготовке студента не мешают ему в дальнейшем овладеть знаниями по специальности в целом.</p> <p>Оценка «неудовлетворительно» ставится за незнание студентом большей части экзаменационного материала, свидетельствует об очень слабом понимании или непонимании предмета и не позволяет ему овладеть знаниями по специальности.</p>								
Всего	36		36				36	

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.1 Печатные и электронные издания:

1. Голубев, Волков, Татьяна, Горячева Структура вещества. Структура кристаллов: учеб. пособие(Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана).
2. Камышов В. М., Мирошникова Е. Г., Татауров В. П. Структура вещества: учебное пособие(Санкт-Петербург: Лань).
3. Голубев, Смирнов, Татьяна, Горячева Структура вещества. Задачи для защиты модуля 1 по курсу химии: метод. указания(Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана).

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

1. Пакет прикладных программ для визуализации и анализа результатов квантово-химического моделирования:
2. Avogadro (свободная лицензия)
3. VESTA (свободная лицензия)
4. ArgusLab (свободная лицензия)
5. MacMolPlt (свободная лицензия)
6. Пакет MatLab.
7. Сопровождение учебного процесса требует применение программного обеспечения, позволяющее создавать, редактировать и представлять текстовый и иллюстративный материал: MSOffice (MSWord, MSExcel, MSPowerPoint).

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. 1 Gordon M.S. Информационный сайт разработчиков программного комплекса "GAMESS" [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.msg.ameslab.gov/games/>
2. 2 База данных кристаллических структур. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.crystallography.net/result.php>
3. 3 Образовательный ресурс кафедры квантовой химии, РХТУ им. Д.И. Менделеева. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://quant.distant.ru/study.htm>
4. 4 База данных базисных наборов. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <https://bse.pnl.gov/bse/portal>
5. 5 База данных структуры и свойств химических соединений. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.webelements.com>

6. 6 Кузубов А.А., Квантовая механика и квантовая химия : учеб.-метод. пособие: в 2 ч. Ч. 1. [Электронный ресурс] / А.А. Кузубов, Н.С. Елисеева, Ф.Н. Томилин, А.А. Шубин. – Электрон. дан. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2013. — Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i-582537.pdf?Z21ID=24116398305A7689081063881013740B&P21DBN=BOOK1&Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-582537>

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Компьютерный класс с доступом машин в сеть Internet.

Лекционная аудитория с возможностью проецирования на мультимедийный экран презентации лекции и примеров работы с интерактивными базами данных.

Дисциплина частично адаптирована для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья, поэтому освоение дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья, в зависимости от нозологий, осуществляется с использованием средств обучения общего и специального назначения.