

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

**Кафедра физической и
неорганической химии
(ФиНХ_ХМФ)**

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий ОП ВО

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

**Кафедра физической и
неорганической химии
(ФиНХ_ХМФ)**

наименование кафедры

**доцент, канд.хим.наук Л.Т.
Денисова**

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА**

Дисциплина Б1.О.03.02.05 ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
Строение вещества

Направление подготовки /
специальность

Направленность
(профиль)

Форма обучения

Год набора

очная

2019

Красноярск 2021

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация

04.05.01.31 Физическая химия

Программу
составили

канд.хим.наук, доцент, Томилин Ф.Н.

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

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

УК-1:Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий	
Уровень 1	знать разные возможные источники получения информации по заданному вопросу
Уровень 1	уметь критически оценивать полученную информацию, сопоставлять между собой данные из разных источников, оценивать их достоверность
Уровень 1	владеть умением критически оценивать и обобщать полученную информацию из разных источников, применять её для решения поставленного вопроса
ОПК-3:Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	
Уровень 1	знать основные теоретические и полуэмпирические модели изучения строения вещества.
Уровень 1	уметь грамотно определить применимость соответствующего метода для изучения строения веществ разных классов.
Уровень 1	владеть умением использовать соответствующие теоретические и полуэмпирические методы и соответствующее программное обеспечение для изучения строения вещества.
ОПК-4:Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	
Уровень 1	знать основные математические и физические законы, используемые в изучении строения вещества
Уровень 1	уметь применять соответствующие законы математики и физики для

	изучения строения вещества
Уровень 1	владеть способностью получать и обрабатывать результаты изучения строения вещества, используя соответствующие законы математики и физики

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина "Строение вещества" является обязательной.

Квантовая механика и квантовая химия

Физические методы исследования

Микроскопические методы анализа

1.5 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)	Семестр
		4
Общая трудоемкость дисциплины	3 (108)	3 (108)
Контактная работа с преподавателем:	2 (72)	2 (72)
занятия лекционного типа	1 (36)	1 (36)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	1 (36)	1 (36)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
Самостоятельная работа обучающихся:	1 (36)	1 (36)
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
Промежуточная аттестация (Зачёт)		

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Введение и математический аппарат квантовой химии	21	18	0	18	ОПК-3 ОПК-4 УК-1
2	Методики расчета молекулярных систем	15	18	0	18	ОПК-3 ОПК-4 УК-1
Всего		36	36	0	36	

3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

1	1	<p>Введение в теорию строения вещества. Содержание понятий “строение вещества” и “структура вещества”. Различные аспекты термина “строение молекул”:</p> <p>топологический, геометрический, электронный и др.</p> <p>Упорядоченные и неупорядоченные структуры конденсированных фаз. Общий обзор методов экспериментального и теоретического изучения строения молекул и строения веществ.</p>	3	0	0
2	1	<p>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:</p> <p>межъядерные расстояния, валентные углы, двугранные и торсионные углы. Внутреннее вращение. Конформации молекул.</p>	3	0	0

3	1	<p>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	0	0
---	---	---	---	---	---

4	1	<p>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	0	0
---	---	---	---	---	---

5	1	<p>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	0	0
6	2	<p>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.</p>	3	0	0

7	2	<p>Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Жидкие кристаллы и другие мезофазы. Аморфные вещества. Жидкости. Особенности строения полимерных фаз.</p>	3	0	0
8	2	<p>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.</p>	3	0	0

9	2	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	0	0
10	2	Поверхность конденсированных фаз. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей. Структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.	3	0	0
Всего			36	0	0

3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

1	1	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	0	0
2	1	Электрон в кулоновском поле: атом водорода. Разделение переменных. Радиальные и угловые функции. Орбитали. Водородоподобные атомы. Понятие об одноэлектронных состояниях. Вырождение одноэлектронных состояний	4	0	0
3	1	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.	2	0	0

4	1	Квантовая система в переменном электромагнитном поле. Временная теория возмущений. Переходы под влиянием излучения. Решение задач на правила отбора.	6	0	0
5	2	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	0	0
6	2	Сингонии кристаллов, их голоэдрические группы и параметры элементарной ячейки. Типы центрировки и решетки Браве. Кристаллографические точечные группы.	6	0	0
7	2	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	0	0
Итого			24	0	0

3.4 Лабораторные занятия

№	№	Наименование занятий	Объем в акад. часах
---	---	----------------------	---------------------

п/п	раздела дисциплины		Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Голубев, Смирнов, Татьяна, Горячева	Строение вещества. Задачи для защиты модуля 1 по курсу химии: метод. указания	Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013

5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Голубев, Волков, Татьяна, Горячева	Строение вещества. Строение кристаллов: учеб. пособие	Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010
Л1.2	Камышов В. М., Мирошникова Е. Г., Тагауров В. П.	Строение вещества: учебное пособие	Санкт-Петербург: Лань, 2017
6.3. Методические разработки			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л3.1	Голубев, Смирнов, Татьяна, Горячева	Строение вещества. Задачи для защиты модуля 1 по курсу химии: метод. указания	Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013

7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Э1	Gordon M.S. Информационный сайт разработчиков программного комплекса "GAMESS"	http://www.msg.ameslab.gov/gamess/
Э2	База данных кристаллических структур	http://www.crystallography.net/result.p

		hp
Э3	Образовательный ресурс кафедры квантовой химии, РХТУ им. Д.И. Менделеева.	http://quant.distant.ru/study.htm
Э4	База данных базисных наборов	https://bse.pnl.gov/bse/portal
Э5	База данных структуры и свойств химических соединений	http://www.webelements.com

8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Самостоятельная работа студентов предусматривает подготовку студента к текущим аудиторным занятиям. Результаты этой подготовки проявляются в активности студента на занятиях, выполнении контрольных работ, написании реферата и других форм текущего контроля. Баллы, полученные студентом по результатам аудиторной работы, формируют рейтинговую оценку текущей успеваемости студента по дисциплине.

Самостоятельная работа студентов предусматривает:

Проработку лекционного материала – 18 ч.

Решение задач (в первом модуле) – 18 ч

Выполнение, оформление и подготовку к защите реферата (во втором модуле)- 18 ч.

При самостоятельном изучении теоретического материала, при подготовке к занятиям, промежуточному контролю и при решении задач студенты используют литературу, рекомендованную преподавателем.

При решении задач рекомендуется пользоваться примерами, разобранными на занятии, а также дополнительной литературой:

Темы рефератов выдаются преподавателями, ведущими практические занятия. При подготовке к защите рефератов студенты помимо рекомендованной и дополнительной литературы проводят литературный поиск, используя библиотеки и Интернет-ресурсы. Если тема доклада пересекается с темой курсовой работы, то в качестве иллюстративного материала рекомендуется использовать ее результаты. Обязательным условием при написании реферата является использование современной научной литературы, а именно статей и монографий, изданных не ранее, чем за последние пять лет, которые студенты ищут самостоятельно.

Публичная защита и обсуждение рефератов проводится во время аудиторного занятия.

1 Строение вещества. Строение кристаллов : учеб. пособие / А.М. Голубев, А.А. Волков, И.В. Татьяна, В.Н. Горячева .— М. : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010, 26 с. (Электронный ресурс <http://rucont.ru/efd/287880>)

2 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>

9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

9.1 Перечень необходимого программного обеспечения

9.1.1	Пакет прикладных программ для визуализации и анализа результатов квантово-химического моделирования:
9.1.2	Avogadro (свободная лицензия)
9.1.3	VESTA (свободная лицензия)
9.1.4	ArgusLab (свободная лицензия)
9.1.5	MacMolPlt (свободная лицензия)
9.1.6	Пакет MatLab.
9.1.7	Сопровождение учебного процесса требует применение программное обеспечения, позволяющее создавать, редактировать и представлять текстовый и иллюстративный материал: MSOffice (MSWord, MExcel, MSPowerPoint).

9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	1 Gordon M.S. Информационный сайт разработчиков программного комплекса “GAMESS” [Электронный ресурс]. — Режим доступа: http://www.msg.ameslab.gov/gamess/
9.2.2	2 База данных кристаллических структур. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: http://www.crystallography.net/result.php
9.2.3	3 Образовательный ресурс кафедры квантовой химии, РХТУ им. Д.И. Менделеева. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: http://quant.distant.ru/study.htm
9.2.4	4 База данных базисных наборов. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: https://bse.pnl.gov/bse/portal
9.2.5	5 База данных структуры и свойств химических соединений. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: http://www.webelements.com

9.2.6	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
-------	---

10 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.