

Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.В.6 Структура вещества»

Уровень высшего образования

БАКАЛАВРИАТ

Направление подготовки

04.03.01 Химия

(код и наименование направления подготовки)

Нефтехимия

(наименование направленности (профиля) образовательной программы)

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Год набора 2021

Рабочая программа дисциплины «Б1.Д.В.6 Строение веществ» рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии

наименование кафедры

протокол № 5 от "14" января 2021 г

Заведующий кафедрой

Кафедра химии

наименование кафедры

подпись

Е.В. Сальникова

расшифровка подписи

Исполнитель:

Профессор

должность

подпись

О.Н. Каныгина

расшифровка подписи

СОГЛАСОВАНО

Председатель методической комиссии по направлению подготовки

04.03.01 Химия

код направления

должность

Е.В. Сальникова

расшифровка подписи

Заведующий отделом комплектования научной библиотеки

Н.Н. Бигалиева

расшифровка подписи

Уполномоченный по качеству факультета

должность

Е.С. Алешина

расшифровка подписи

№ регистрации

© Каныгина О.Н., 2021
© ОГУ, 2021

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Цели освоения дисциплины:

- раскрытие физического смысла и взаимосвязи основных законов, описывающих строение вещества, приобретение студентами современных знаний о строении вещества.
- объединение и углубление фундаментальных знаний в области основных законов естествознания, способствующих формированию современного научного мировоззрения.
- изучение студентами теоретических основ современных представлений о строении атомов, молекул, кристаллов, природе химической связи

Задачи - научить обучающихся:

- использовать современные математические модели для построения конкретных молекул и интерпретации молекулярного взаимодействия;
- систематизировать научную информацию для визуализации структурных превращений в конденсированных средах;
- приобретение навыков применения методов теории химического строения на практике.

Программа дисциплины предусматривает наличие знаний у студентов основных разделов курса физики и высшей математики.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательным дисциплинам (модулям) вариативной части блока Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.12 Физика, Б1.Д.Б.23 Квантовая химия*

Постреквизиты дисциплины: *Б2.П.В.П.2 Преддипломная практика*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1-В-1 Применяет философские основы познания и логического мышления, методы научного познания, в том числе методы системного анализа, для решения поставленных задач УК-1-В-2 Осуществляет критический анализ и синтез информации, полученной из разных источников УК-1-В-4 Применяет методы сбора, хранения, обработки, передачи, анализа и синтеза информации с использованием компьютерных технологий для решения поставленных	Знать: - философские основы познания и логического мышления, методы научного познания, в том числе методы системного анализа; Уметь: - применять методы сбора, хранения, обработки, передачи, анализа и синтеза информации с использованием компьютерных технологий; критически анализировать информацию,

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
	задач УК-1-В-5 Формулирует и аргументирует выводы и суждения, в том числе с применением философского понятийного аппарата	полученную из разных источников Владеть: -философским понятийным аппаратом, методами системного анализа для решения поставленных задач
ПК*-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК*-1-В-1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР ПК*-1-В-3 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР	Знать: -технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности Уметь: -планировать отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР Владеть: - техническими средствами и методами испытаний (из набора имеющихся) для решения задач, поставленных специалистом более высокой квалификации

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных единиц (180 академических часов).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	4 семестр	всего
Общая трудоёмкость	180	180
Контактная работа:	85,5	85,5
Лекции (Л)	34	34
Лабораторные работы (ЛР)	50	50
Индивидуальная работа и инновационные формы учебных занятий	1	1
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,5	0,5
Самостоятельная работа: - <i>выполнение курсовой работы (КР);</i> <i>самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий);</i> - <i>подготовка к лабораторным занятиям;</i> - <i>подготовка к рубежному и промежуточному контролю.</i>	94,5 +	94,5
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	диф. зач.	

Разделы дисциплины, изучаемые в 4 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Строение молекул	44	8		12	24
2	Межмолекулярные взаимодействия	46	8		12	26
3	Строение конденсированных фаз	44	10		12	22
4	Новые структуры	46	8		14	24
	Всего:	180	34		50	96

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел №1. Строение молекул

Основные положения классической теории химического строения. Строение атома. Структурная формула молекулы: межъядерные расстояния, валентные углы, двугранные и торсионные углы, Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Квантовые состояния молекулы.

Колебания молекул. Среднеквадратичные смещения атомов (амплитуды колебаний). Вращение молекул как целого. Различные типы молекулярных волчков.

Электронное строение молекул. Молекулярные орбитали. Интерпретация строения молекул основе орбитальных моделей.

Симметрия молекулярных систем. Элементы и операции симметрии ядерной конфигурации молекулы. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей. Орбитальные корреляционные диаграммы,

Раздел №2. Межмолекулярные взаимодействия

Электрические и магнитные свойства молекул

Дипольный момент и поляризуемость молекул, магнитный момент и магнитная восприимчивость молекул. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул.

Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства веществ.

Молекулы простых и координационных неорганических соединений.

Раздел № 3. Строение конденсированных фаз

Строение жидкостей и аморфных веществ Структура простых жидкостей. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов и неэлектролитов.

Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей. Структура границы раздела конденсированных фаз. Структура адсорбционных слоев. Современные модели эволюции структуры в жидкостях. Коллоидные растворы, микроэмульсии. Мицеллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.). Структуры стекол. Особенности строения полимерных фаз. Классы высокомолекулярных соединений. Полиядерные комплексные соединения. Хелаты. Строение органических соединений. Полиэдраны. Металлоцены. Соединения включения (клатраты). Ротаксаны и катенаны. Полимеры и биополимеры. Белки.

Строение кристаллов. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы дефектов в реальных кристаллах. Симметрия кристаллов. Строение твердых растворов. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов- цепочечные, слоистые и каркасные структуры. Динамика кристаллической решетки.

Раздел № 4. Новые структуры

Наночастицы и наноструктуры. Фуллерены. Двумерные структуры, структуры поверхностных слоев. Низкоразмерные структуры, методы их исследования. Пористые наноструктуры Элементоорганические соединения. Кластеры.

4.3 Лабораторные работы

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
1	1	Квантовые числа и их содержание. Строение атома.	2
2,3		Заполнение электронных уровней.	
4-6		Визуализация электронных конфигураций атомов при решении задач на правила Хунда, Клечковского.	4
		Построение корреляционных диаграмм МО для двухатомных гомоядерных и гетероядерных молекул многоатомных молекул	6
7-9	2	Определение электрических параметров молекул, поляризации (с элементами визуализации).	6
10-12		Компьютерная визуализация различных типов межмолекулярных взаимодействий.	6
13-15	3	Определение элементов структурной кристаллохимии	6
16-18		Определение элементов симметрии в кристаллах и молекулах	6
19-21	4	Визуализация с помощью структурных формул сложных координационных соединений.	6
22-24		Визуализация наноструктур и низкоразмерных систем	6
25		Защита курсовой работы (презентация)	2
25		Итого:	50

4.4 Курсовая работа (4 семестр)

Примерные темы курсовой работы

1. Структура оксидов железа
2. Взаимодействие рентгеновских лучей с кристаллами
3. Получение наночастиц из коллоидных растворов
4. Полиморфные модификации углерода
5. Современная модель строения жидкости: ассоциаты, кластеры и мицеллы
6. Строение «жидких кристаллов»
7. Новые пористые наноструктуры, MOF
8. Сопоставление структур неорганических и органических веществ.
9. Строение полимеров – термопластов

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1 Основная литература

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия: учеб. для хим. спец. / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко.- 7-е изд., стер. - М. : Высш. шк., 2009. - 528 с. ISBN 978-5-06-006161-1.

5.2 Дополнительная литература

2. Нанотехнологии. Ударный вводный курс [Текст] : учебное пособие / Р. Х. Мартин-Пальма, А. Лахтакия; пер. с англ.: Е. Г. Заблоцкой, А. В. Заблоцкого.- 2-е изд. - Долгопрудный : Интеллект, 2017. - 208 с. : ил. - Библиогр. в конце гл. - ISBN 978-5-91559-238-3.2.
3. Экология наноматериалов [Текст] : учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки 152200 "Наноинженерия" / А. Ю. Годымчук,

Г. Г. Савельев, А. П. Зыкова; под ред. Л. Н. Патрикеева, А. А. Ревинной. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2017. - 272 с. : ил. - (Нанотехнологии). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 978-5-9963-0523.

4. Политика и позиции России в нанотехнологиях: среднесрочный взгляд / Александр Терехов // Экономические стратегии, 2017. - № 7. - С. 132-140. - Библиогр.: с. 140.

5. Каныгина, О. Н. Кристаллы, кристаллизация [Электронный ресурс] : методические указания для обучающихся по образовательной программе высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 Химия / О. Н. Каныгина, Л. Н. Гуслевская; М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т", Каф. химии. - Оренбург : ОГУ. - 2018. - 32 с.

6. Бердинский В. Л. Кристаллофизика [Электронный ресурс]: уч. пособие для студентов, обучающихся по программам высшего образования по направлениям подготовки 03.04.02 Физика и 04.04.01 Химия / В. Л. Бердинский, О. Н. Каныгина, А. Г. Четверикова; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. унт". - Оренбург : ОГУ. - 2016. - ISBN 978-5-7410-1619-0. - 104 с.

5.3 Периодические издания

1. Оптика и спектроскопия : журнал. - М.: Академиздатцентр «Наука» РАН, 2020

5.4 Интернет-ресурсы

<http://mipt.ru/> Сайт Московского физико-технического института

<http://www.msu.ru> Сайт Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова

<http://www.edu.ru/> Федеральный портал «Российское образование»

<http://www.orenport.ru/> Региональный портал образовательного сообщества Оренбуржья

<http://fepo.i-exam.ru/> Федеральный экзамен в сфере профессионального образования <http://i-exam.ru/node/> Единый портал интернет тестирования в сфере образования

<http://training.i-exam.ru/> Интернет - тренажеры в сфере образования

<https://www.lektorium.tv/mooc> - «Лекториум» <http://biblioclub.ru/> -

ЭБС Университетская библиотека онлайн <http://www.physbook.ru/> - электронные учебники и журналы по химии

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Операционная система Windows (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ).

2. Пакет настольных приложений Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint) (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ) для подготовки текстовых документов, обработки экспериментальных результатов и демонстрации презентаций.

3. Springer [Электронный ресурс] : база данных научных книг, журналов, справочных материалов / компания Springer Customer Service Center GmbH . – Режим доступа : <https://link.springer.com/>, в локальной сети ОГУ.

4. ГАРАНТ Платформа F1 [Электронный ресурс]: справочно-правовая система /Разработчик ООО НПП «Гарант- Сервис», 121992 Москва, Воробьевы горы, МГУ, [1992-2021].- Режим доступа в сети ОГУ для установки системы: [\\fileserv1\garant.exe](http://fileserv1\garant.exe).

5. КонсультантПлюс [Электронный ресурс]: электронное периодическое издание справочная правовая система / Разработчик ЗАО «Консультант Плюс, [1992-2021].- Режим доступа к системе в сети ОГУ для установки системы: [\\fileserv1\!CONSULT\cons.exe](http://fileserv1\!CONSULT\cons.exe).

6. Web of Science [Электронный ресурс]: реферативная база данных / компания Clarivate Analytics. – Режим доступа : <http://apps.webofknowledge.com/>, в локальной сети ОГУ.

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения занятий лекционного типа, используется аудитория оснащенная комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения лабораторных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации используются специализированные лаборатории, оснащенные оборудованием.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащено компьютерной техникой, подключенной к сети "Интернет", и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ОГУ.