

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра химии



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Батыгов З.О.

«25» мая 2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки /специальность: 04.05.01.

Фундаментальная и прикладная химия.

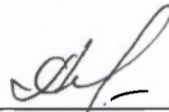
Программа: специалитет

Квалификация (степень) выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очная

МАГАС 20 18 г.

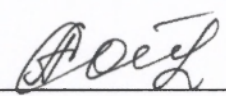
Составители рабочей программы

доцент, к.х.н.  / Китиева Л.И. /

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

Протокол заседания № 6 от «24» апреля 2018г.

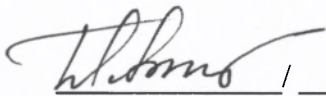
/Заведующий кафедрой

 / Султыгова З.Х. /

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом
химико-биологического факультета

Протокол заседания № 4 от «28» апреля 2018г.

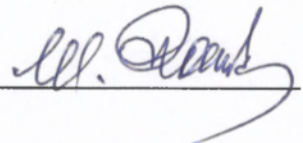
Председатель учебно-методического совета

 / Плиева А.М. /

Программа рассмотрена на заседании Учебно-методического совета университета

протокол № 5 от «23» мая 2018 г.

Председатель Учебно-методического совета университета

 / Хашагульгов Ш.Б. /

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Строение вещества» являются: изучение студентами теоретических основ современных представлений о строении атомов, молекул, кристаллов; углубленное изучение теории химической связи и реакционной способности веществ; строения и свойств вещества и составляющих его частиц; последовательно развивать первоначальные сведения о теории строения вещества, полученные студентами при изучении дисциплин «Общая химия» и «Квантовая химия»; рассмотреть вопросы теории химической связи и электронного строения молекул, строения конденсированных фаз, а также взаимосвязи реакционной способности и строения молекул.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Курс «Строение вещества» входит в базовую часть дисциплин и изучается в 5 семестре. Строение вещества – это базовый курс, изучающий в широком плане структурные особенности всех видов материи, обладающих ненулевой массой покоя. Химики изучают главным образом вещества, организованные в атомы, молекулы, ионы и радикалы, причем во всех известных агрегатных состояниях – газообразном, жидком, твердом и плазменном.

Современные представления о строении вещества основаны на базовых принципах и используют методы квантовой механики и квантовой химии.

В значительной степени курсы «Квантовая химия» и «Строение вещества» дополняют друг друга. Курс «Строение вещества» является фундаментом всей современной теоретической химии, включающей как квантовую химию, так и классическую теорию химического строения.

Таблица 2.1.

Связь дисциплины «Строение вещества» с предшествующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, предшествующие дисциплине «Строение вещества»	Семестр
Б1.Б.6	Математика	1-4

Б1.Б.7	Физика	1-4
Б1.Б.8	Информатика	2
Б1.Б.12	Неорганическая химия	1,2
Б1.Б.19	Квантовая химия	4

Таблица 2.2.

Связь дисциплины «Строение вещества» с последующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Строение вещества»	Семестр
Б1.Б.14	Органическая химия	5,6
Б1.Б.15	Физическая химия	5,6
Б1.Б.20	Физические методы исследования	8
Б1.Б.16	Химические основы биологических процессов	6
Б1.Б.17	Высокомолекулярные соединения	7
Б1.Б.21	Коллоидная химия	7
Б1.В.ОД.4	Теоретические основы неорганической химии	9

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

• **Знать:**

- основные понятия теоретической и прикладной химии;
- основные положения курса «Общая и неорганическая химия».
- основу теорий МО;
- основные типы взаимодействий в веществе

• **Уметь:**

- использовать научную терминологию;
- применять различные теории для решения поставленной задачи;
- изображать структуру различных веществ;
- составлять формулу по названию и название по структурной формуле;
- объяснять на качественном уровне взаимосвязь строения и свойств молекул.

• **Владеть:**

- пространственным мышлением;
- основными понятиями химии;
- навыками поиска и обработки информации;
- представлениями о химических взаимодействиях.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

- а) **общепрофессиональных (ОПК) - ОПК-1.**
- б) **профессиональных (ПК) – ПК-4, ПК-7.**

Таблица 3.1.

Матрица связи компетенций, формируемых на основе изучения дисциплины «Строение вещества», с временными этапами освоения ее содержания

Коды компетенций (ФГОС)	Компетенция	Семестр изучения
ОПК-1	Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	5
ПК-4	Способность применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов	5
ПК-7	Готовность представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)	5

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	5 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	216	216
Аудиторные занятия	104	104
Лекции	34	34
Практические занятия	68	68
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
Самостоятельная работа студентов (СРС)	76	76
Контроль	36	36

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

Таблица 5.1.

Структура и содержание дисциплины

№ п/п	Раздел Дисциплины	Семестр		Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)			Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
		Неделя семестра		лекция	практ.	сам.р.	
1	Основные типы взаимодействий в веществе. Агрегатные состояния вещества	5	1	2	2	4	
2	Орбитали неклассических	5	2	2	2	4	

	органических структур						
3	Полиэдрические органические молекулы и ионы	5	3	2	4	4	
4	Теория кристаллического поля	5	4	1	4	4	
5	МО координационных соединений	5	5	2	4	6	
6	Правила электронного счета	5	6	2	4	4	
7	Деформации координационных полиэдров	5	7	2	4	4	
8	Строение боранов и карборанов	5	8	1	4	4	
9	Металлосодержащие кластеры	5	9	2	4	4	
10	Структурно нежесткие молекулы. Основные типы структурной нежесткости	5	10	2	4	4	
11	Межмолекулярные взаимодействия	5	11, 12	4	4	4	Тестовый контроль
12	Различные формы потенциальных функций для парных межмолекулярных взаимодействий	5	13	2	4	4	
13	Строение жидкостей и аморфных веществ	5	14	2	4	4	
14	Строение мезофаз. Методы изучения структуры мезофаз	5	15	2	4	4	
15	Строение кристаллов. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура	5	16	2	4	4	Тестовый контроль
16	Реальные ионные кристаллы. Ионная проводимость	5	17	2	4	6	Тестовый контроль
17	Строение металлов. Зонная теория металлов	5	18	2	4	4	
18	Поверхность конденсированных фаз. Особенности	5	19	2	4	4	Тестовый контроль

	строения поверхности кристаллов и жидкостей						
	ИТОГО:			34	68	76	

Таблица 5.2.

Конкретизация результатов освоения дисциплины

<i>ОПК-1 Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач</i>		
Знать: теоретические основы фундаментальных разделов химии (неорганической, органической, аналитической, физической, квантовой и др.), экологии, технологий химического производства.	Уметь: пользоваться современными представлениями основных разделов химии для объяснения взаимосвязи «состав-строение-свойства-применение-получение веществ с заданными свойствами».	Владеть: навыками решения теоретических и экспериментальных задач
<i>ПК-4 Способность применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов</i>		
Знать: основные естественно-научные законы.	Уметь: использовать основные естественнонаучные законы для описания строения и свойств веществ, для объяснения результатов химических экспериментов; для объяснения специфики поведения химических соединений; обосновывать полученные выводы, применять методы математического анализа при решении прикладных задач.	Владеть: содержанием естественно-научных законов.
<i>ПК-7 Готовность представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)</i>		
Знать: требования к оформлению рефератов, научных сообщений, статей для печати и т.п.	Уметь: представлять экспериментальные результаты в виде отчетов и научных публикаций	Владеть: опытом участия в научных дискуссиях.

	(стендовые доклады, рефераты, статьи в периодической научной печати), в устном выступлении (доклады, презентации).	
--	--	--

Содержание дисциплины «Строение вещества»

1. Основные типы взаимодействий в веществе, их порядок (слабые, сильные, электромагнитные и гравитационные). Агрегатные состояния вещества. Обзор важнейших экспериментальных методов изучения строения вещества. Сканирующая туннельная и атомно-силовая спектроскопии. Фемтосекундная спектроскопия.

2. Орбитали неклассических органических структур. Ион метония CH_5^+ . MO циклических напряженных структур. Пирамидан, катион Мазамуне. Правила электронного счета для пирамидальных систем симметрии C_{3v} .

3. Полиэдрические органические молекулы и ионы. Тела Платона и Архимеда в органической химии. Трехмерная ароматичность. Фуллерены. Углеродные нанотрубки.

4. Теория кристаллического поля (ТКП). Расщепление d-АО центрального иона. Количественная оценка расщеплений. Спектрохимический ряд. Комплексы сильного и слабого полей. ТКП и магнитные свойства комплексов. Энергия стабилизации кристаллическим полем.

5. Применение теории MO для описания электронного строения координационных соединений. MO координационных соединений с лигандами, имеющими σ -орбитали. MO координационных соединений с лигандами, имеющими σ - и π -орбитали.

6. Правила электронного счета: 18 \bar{e} , 16 \bar{e} , 14 \bar{e} . Концепция изолобальной аналогии. Агостическая связь. Сравнение важнейших электроноэквивалентных фрагментов и молекул.

7. Деформации координационных полиэдров. Эффекты Яна-Теллера. Теорема Яна-Теллера. Экспериментальные проявления эффектов Яна-Теллера.

8. Строение боранов и карборанов. Орбитали диборана. Критика концепции электронного дефицита. Дельтаэдрические структуры. Клозо-, нидо-, арахно-, гифо-структуры. Правила электронного счета Уэйда.

9. Металлосодержащие кластеры. Классификация кластеров. Правило эффективного атомного номера (ЭАН). Значение кластеров для нанохимии.

10. Структурно нежесткие молекулы. Основные типы структурной нежесткости.

Политопные перегруппировки. Пирамидальная и плоская инверсия. Тетраэдрическая инверсия тетракоординированных структур. Проблема плоского поликоординированного атома углерода. Псевдовращение Берри.

11. Межмолекулярные взаимодействия. Приближенное описание межмолекулярных взаимодействий в разреженных газах как суммы дисперсионных, ориентационных и индукционных взаимодействий. Ван-дер-Ваальсовы силы.

12. Различные формы потенциальных функций для парных межмолекулярных взаимодействий. Специфические межмолекулярные взаимодействия. Водородная связь, ее типы. Клатраты. Классификация клатратов. Понятие о супрамолекулярной химии.

13. Строение жидкостей и аморфных веществ. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Специфика аморфного состояния. Правила Захариасена. Понятие о сверх- и субкритических флюидах. Принципы зеленой химии.

14. Строение мезофаз. Методы изучения структуры мезофаз. пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики, дискотики).

15. Строение кристаллов. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Теорема Делоне. Трансляционная симметрия. Классификация кристаллов по Белову. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Фононный спектр кристалла. Квазикристаллы. Паркетты Пенроуза и Маккея. Энергии кристаллических решеток.

16. Реальные ионные кристаллы. Ионная проводимость. Суперионные проводники (СИП). Сегнето-, пиро- и пьезоэлектрические эффекты. Проблема холодного ядерного синтеза.

17. Строение металлов. Зонная теория металлов. Функции Блоха. Плотность состояний. Поверхность Ферми. Понятие о зонах Бриллюэна. Сверхпроводимость. Квантовый эффект Холла. Сплавы металлов. Правило Юм-Розери.

18. Поверхность конденсированных фаз. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей. Структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности. Структура адсорбционных слоев.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений студентов с докладами (рефератами)
2. Групповой разбор результатов контрольных работ
3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Лекционные занятия проводятся 1 раз неделю в объеме 2 часов и 2 часов практических занятий в пятом семестре. После окончания изучения каждой темы студенты проходят тестирование, собеседование, выполняют контрольные работы.

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. – М.: Мир, 1975.
2. Дей К. , Селбин Д. Теоретическая неорганическая химия. –М.: Химия, 1976.
3. Карапетьянц М.Х. Дракин С.Н. Структура вещества. -М.: Высшая школа, 1977.
4. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. –М.: Высшая школа, 1977.

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.. Содержание самостоятельной работы обучающихся

<i>Номер раздела (темы)</i>	<i>Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение</i>	<i>Кол-во часов</i>	<i>Формы работы</i>
I.	Качественные методы определения пространственного и электронного строения молекул. Принципы качественной теории МО. Взаимодействие двух орбиталей. Взаимодействие не-скольких орбиталей фрагментов. Орбитали связей и групп.	10	собеседование, тестовый контроль

2.	Синтезы тетраэдрана, кубана и додекаэдрана. Координационная связь. Типы координационных полиэдров. Теория Гиллеспи и координационные соединения. Концепция гибридизации и строение координационных соединений.	10	
3.	π -Комплексы и металлоцены. МО ферроцена. Модель Дьюара-Чатта-Дункансона.	10	Собеседование, тестовый контроль
4.	Правила Мингоса.	8	Собеседование, тестовый контроль
5.	Методы исследования структурно нежестких молекул. Электронная природа структурной нежесткости. Структурно нежесткие молекулы с высокими координационными числами. Внутреннее вращение. туннельный механизм превращений структурно нежестких молекул. Принципы работы лазеров, мазеров и иризеров.	10	собеседование, тестовый контроль
6.	π -Комплексы и комплексы с переносом заряда.	10	собеседование, тестовый контроль
7.	Цикл Борна-Габера.	10	собеседование, тестовый контроль
8.	Полиморфизм и аллотропия.	8	собеседование, тестовый контроль

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Фонды оценочных средств и критерии оценки представлены отдельно, как приложение к рабочей программе.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература:

1. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Введение в теорию. – Л.: Химия, 1986.

2. Блохинцев А.И. Основы квантовой механики. –М.: Наука, 1976.
3. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. – М.: Мир, 1975.
4. Дей К., Селбин Д. Теоретическая неорганическая химия. –М.: Химия, 1976.
5. Карапетьянц М.Х. Дракин С.Н. Строение вещества. –М.: Высшая школа, 1977.
6. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. –М.: Высшая школа, 1977.
7. Лер Р., Марчанд А. Орбитальная симметрия в вопросах и ответах. –М.: Мир, 1976.
8. Маррел Дж., Кеттл С., Теддер Дж. Химическая связь. –М.: Мир, 1980.
9. Мелешина А. М. Курс квантовой механики для химиков. –М.: Высшая школа, 1980.
10. Минкин В.И., Миняев Р.М. Неклассические структуры органических соединений. – Ростов-на-Дону: РГУ, 1985.
11. Минкин В.И., Олехнович Л.П., Жданов Ю.А. Молекулярный дизайн таутомерных систем. – Ростов-на-Дону: РГУ, 1977.
12. Минкин В.И., Миняев Р.М., Симкин Б. Я. Теория строения молекул. Феникс 1997. Ростов – на- Дону.
13. Минкин В.И., Миняев Р.М., Симкин Б. Я. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. –М.: Химия, 1986.
14. Папулов Е. Г. Строение молекул. – Тверь: ТГУ, 1995. Папулов Е. Г., Строение молекул. –Тверь: ТГУ, 1995.
15. Симкин Б.Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
16. Фларри Р. Квантовая химия. – М.: Мир, 1985.
17. Харгитаи И., Харгитаи М. Симметрия глазами химика. –М.: Мир, 1989.
18. Хофман Р. Строение твердых тел и поверхностей: взгляд химика – теоретика. –М.: Мир, 1990.
19. Эткинс П. Кванты. Справочник концепций. –М.: Мир, 1997.
20. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. – Киев: Вища школа, 1976.

б) дополнительная литература:

1. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. –М.: Высшая школа, 1989.
2. Бальхаузен К. Введение в теорию поля лигандов. –М.: Мир, 1964.

3. Блюменфельд Л.А., Кукушкин А.К. Курс квантовой химии и строения молекул. –М.: МГУ, 1980.
4. Введение в квантовую химию. –М.: Мир, 1982.
5. Вудворд Р., Хофман Р. Сохранение орбитальной симметрии. –М.: Мир, 1976.
6. Давтян О.К. Квантовая химия. –М.: Высшая школа, 1962.
7. Джаффе Г., Орчин Н. Симметрия в химии. –М.: Мир, 1967.
8. Джонсон К. Численные методы в химии. –М.: Мир, 1983.
9. Дмитриев И.С. Молекулы без химических связей. –Л.: Химия, 1980.
10. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. –М.: Мир, 1972.
11. Дяткина М.Е. Основы теории молекулярных орбиталей. –М.: Наука. 1975.
12. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. –М.: Мир, 1979.
13. Кларк Т. Компьютерная химия. –М.: Мир, 1990.
14. Флайгер У. Строение и динамика молекул. –М.: Мир, 1982. Т. 1,2.
15. Фларри Р. Группы симметрии. Теория и химические приложения. М.: Мир, 1983.
16. Футзинага С. Метод молекулярных орбиталей. – М.: Мир, 1983.
17. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. – М.: Химия, 1987.
18. Цюлике Л. Квантовая химия. – М.: Мир, 1976.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

<http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>
<http://www.chemport.ru/?cid=29>
<http://www.pxy.ru/f/otf/quant/method/lectures/lectures.htm>
<http://jarosh.by.ru/science.shtml>
<http://ftp.kinetics.nsc.ru/chichinin/index.htm>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

- лекционные аудитории;
- аудитории для семинарских занятий;
- проекционное оборудование и компьютер.