

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Щёкина Бера Витальевна

Должность: Ректор

Дата подписания: 14.01.2015 10:25:38

Уникальный программный ключ:

a2232a55157e576551a81c9b110789af56989420420336ffbf573a434e57789



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

ФГБОУ ВПО «Благовещенский государственный педагогический университет»

ПРОГРАММА АСПИРАНТУРЫ

Рабочая программа дисциплины



Утверждаю
Проректор по НР
Т.Д. Каргина
4 июня 2015 г.

Рабочая программа дисциплины

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

(с изменениями и дополнениями 2015 г.)

Направление подготовки

04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль)

ХИМИЯ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Квалификация выпускника - Исследователь. Преподаватель-исследователь

**Принята на заседании кафедры химии
(протокол № 1 от «17» сентября 2014 г.)**

**Принята
на заседании Учёного совета
естественно-географического факультета
(протокол № 2 от 22.10. 2014 г.)**

Благовещенск 2015

СОДЕРЖАНИЕ

№		стр.
1	Пояснительная записка	3
2	Учебно-тематический план	3
3	Содержание разделов (тем)	4
4	Методические рекомендации (указания) аспирантам по изучению дисциплины	7
5	Практикум по дисциплине.....	8
6	Дидактические материалы для контроля (самоконтроля) усвоенного материала	8
7	Перечень информационных технологий, используемых в процессе обучения...	16
8	Список литературы и информационных ресурсов	16
9	Материально-техническая база	17
10	Лист изменений и дополнений	18

1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель дисциплины: углубить знания о теории химической связи и межмолекулярных взаимодействиях и связи микроскопических свойств молекул с макроскопическими характеристиками веществ.

Место дисциплины в структуре ООП.

Дисциплина «Строение вещества» относится к дисциплинам вариативной части Блока 1.

Дисциплина «Строение вещества» тесно связана и опирается на такие ранее изученные дисциплины, как физика, математика, неорганическая химия, квантовая химия, физические методы исследования.

Для освоения дисциплины «Строение вещества» необходимы хорошая математическая подготовка и основательные знания курсов физики, общей и неорганической, квантовой химии, физической химии.

Требования к результатам освоения дисциплины.

Дисциплина направлена на формирование компетенции ОПК-1 и результатов обучения, представленных в таблице.

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения
ОПК-1: способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.	З (ОПК-1)-1 знать: современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности; У (ОПК-1)-1 уметь: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования; В (ОПК-1)-1 владеть: навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единицы (72 ч.).

Программа предусматривает изучение материала на лекционных занятиях. Предусмотрена самостоятельная работа аспирантов по темам и разделам.

ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры
Общая трудоемкость	72	3
Аудиторные занятия	36	
Лекции	36	
Лабораторные работы	-	
Самостоятельная работа	36	
Вид итогового контроля		зачет

2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

№ п/п	Наименование разделов	Всего часов	Виды уч. занятий		
			ЛК	ПР	СР
I	Геометрия молекул.	12	6		6
II	Средние энергетические характеристики молекул.	12	6		6
III	Электрические и магнитные свойства молекул. Электрический дипольный момент. Поляризуемость. Молекулы во внешнем электрическом поле.	12	6		6

IV	Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул. Электронные состояния и спектры молекул. Колебательные состояния и спектры молекул. Вращательные состояния и спектры молекул.	12	6		6
V	Межмолекулярные взаимодействия.	12	6		
VI	Конденсированное состояние. Кристаллическое состояние. Свойства поверхностей и границ раздела. Жидкое состояние. Аморфные вещества.	12	6		6
	Всего	72	36	-	36

**Интерактивное обучение по дисциплине
«Строение вещества»**

№	Тема занятия	Вид занятия	Форма интерактивного занятия	Кол-во часов
1	Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии.	ЛК	Лекция-консультация	2
2	Дифракционные методы.	ЛК	Лекция-дискуссия	2
3	Потенциальные функции нежестких молекул. Явления внутреннего вращения, политопии, таутомерии молекул.	ЛК	Лекция-консультация	2
4	Экспериментальные доказательства существования межмолекулярных взаимодействий. Ван-дер-ваальсовы силы.	ЛК	Лекция-дискуссия	2
5	Строение твердых тел. Дефекты в кристаллах. Строение жидкостей. Ближний порядок. Функции распределения частиц. Теории строения жидкостей. Аморфные вещества. Мезофазы.	ЛК	Лекция-консультация	2
	Всего			10

3 СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ (ТЕМ)

I. ГЕОМЕТРИЯ МОЛЕКУЛ

1. Параметры, определяющие геометрию молекулы

Понятие равновесной геометрической конфигурации молекулы, различные способы ее описания. Параметры, определяющие геометрию молекулы: межъядерные расстояния, валентные углы, углы внутреннего вращения.

Закономерности в равновесных значениях межъядерных расстояний связанных атомов. Зависимость длин связей от ближайшего окружения.

Закономерности в равновесных значениях двугранных углов и углов внутреннего вращения. Конформации молекулы.

Закономерности в равновесных значениях валентных углов. Интерпретация направленности химических связей (методы ВС и МО). Гибридизация атомных орбиталей

и пространственная направленность химических связей. Недостатки концепции гибридизации как средства описания геометрической структуры молекулы.

2. Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей (ОЭПВО)

Правила Гиллеспи. Отклонения от предсказаний теории ОЭПВО. Качественная теория молекулярных орбиталей.

3. Элементарные сведения о свойствах симметрии молекул

Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии. Точечные группы симметрии. Приводимые и неприводимые представления, характеры представлений. Применение теории групп в химии.

4. Установление геометрических параметров молекул

Дифракционные методы. Дифракция рентгеновских лучей. Рентгеновская кристаллография. Рентгеноструктурный анализ. Возможности и ограничения методов. Дифракция нейтронов. Достоинства и недостатки метода. Дифракция электронов. Электронографический метод. Спектроскопические методы. Их классификация. Области применения.

5. Структурно нежесткие молекулы

Потенциальные функции нежестких молекул. Явления внутреннего вращения, политопии, таутомерии молекул. Потенциальные барьеры. Динамическая изомерия молекул. Электронная природа структурной нежесткости молекул. Туннельный механизм превращений структурно нежестких молекул. Физические методы исследования нежестких молекул. Электронная природа структурной нежесткости молекул.

II. СРЕДНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОЛЕКУЛ

Энергия образования из простых веществ и свободных атомов. Энергия образования как сумма эффективных парциальных энергий, сопоставляемых отдельным связям молекул. Представление энтальпии образования молекулы как суммы величин, сопоставляемых отдельным связям.

III. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ

1. Электрический дипольный момент

Электрический дипольный момент. Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекулы. Дипольный момент и изомерия молекул. Экспериментальные методы измерения дипольных моментов. Парциальные моменты связей и структурных групп. Векторная аддитивная схема расчета дипольных моментов.

2. Индуцированный дипольный момент, поляризуемость

Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный момент и поляризуемость молекулы. Анизотропия поляризуемости, средняя поляризуемость. Эллипсоид поляризуемости. Эллипсоид поляризуемости и симметрия молекул.

3. Молекулы во внешнем электрическом поле

Связь молекулярных постоянных - дипольного момента и поляризуемости - с макроскопическими характеристиками веществ (диэлектрической проницаемостью и показателем преломления). Поляризации диэлектрика в статическом поле и поле определенной частоты. Уравнение Ланжевена-Дебая. Уравнение Клаузиуса-Моссотти. Молярная рефракция.

4. Магнитные свойства ядер и электронов. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекулы в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Магнитная поляризация. Связь макроскопической характеристики вещества - магнитной проницаемости - с магнитными свойствами молекул.

IV. ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ

Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих. Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии молекулы.

Электронные состояния. Потенциальные функции двухатомных молекул и потенциальные поверхности многоатомных молекул. Классификация электронных состояний

двухатомных молекул по проекции орбитального момента и спина электронов. Свойства симметрии электронных волновых функций двухатомных молекул. Классификация электронных состояний и электронных волновых функций многоатомных молекул. Различия свойств молекул в различных электронных состояниях.

Колебательные состояния. Колебание двухатомной молекулы согласно классической теории в приближении гармонического осциллятора. Колебательные состояния двухатомной молекулы в приближениях гармонического и ангармонического осцилляторов. Классическая теория малых колебаний многоатомных молекул. Кинетическая и потенциальная энергия, нормальные координаты, нормальные колебания. Характеристичность колебаний, групповые колебания. Колебательные состояния многоатомных молекул согласно квантовой механике.

Вращательные состояния. Вращение двухатомной молекулы согласно классической теории в приближении жесткого ротатора. Вращательные состояния двухатомной молекулы согласно квантовой механике в приближениях жесткого и нежесткого колеблющегося ротатора. Классическая теория вращения многоатомных молекул. Момент количества движения и кинетическая энергия вращения. Классификация многоатомных молекул по симметрии эллипсоида инерции. Квантово-механическая теория вращательных состояний многоатомных молекул. Линейные молекулы, молекулы типов сферического, симметричного и асимметричного волчков. Системы вращательных уровней энергии.

Вращательные, колебательные и электронные спектры молекул. Дипольный момент и поляризуемость молекул в различных электронно-колебательно-вращательных состояниях. Правила отбора для спектров испускания, поглощения и комбинационного рассеяния. Структура спектров. Получение экспериментальных значений энергии диссоциации двухатомной молекулы, геометрических параметров и другой структурной информации о молекулах из электронных, колебательных и вращательных спектров.

V. МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Экспериментальные доказательства существования межмолекулярных взаимодействий. Ван-дер-ваальсовы силы. Общность физической природы внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий. Приближенное описание межмолекулярных взаимодействий как суммы ориентационных (эффект Кезома), индукционных (эффект Дебая) и дисперсионных (эффект Лондона) взаимодействий. Межмолекулярное отталкивание. Уравнение Леннарда-Джонса. Проявление межмолекулярных взаимодействий в свойствах веществ. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Ионно-молекулярное взаимодействие.

VI. КОНДЕНСИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ

Строение твердых тел. Классификация твердых тел. Кристаллическое состояние. Дальний порядок. Типы кристаллических решеток в зависимости от природы связи (ковалентная, ионная, металлическая, межмолекулярное взаимодействие). Свойства веществ с различными типами кристаллических решеток.

Дефекты в кристаллах. Атомные дефекты. Примесные дефекты. Нестехиометричность. Линейные и плоские дефекты.

Методы исследования твердых тел. Микроскопические методы исследования. Дифракционные методы исследования. Методы определения элементного состава. Методы исследования ближнего окружения и окислительного состояния атома. Термоаналитические методы.

Строение жидкостей. Ближний порядок. Функции распределения частиц. Теории строения жидкостей.

Аморфные вещества. Мезофазы.

4 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) АСПИРАНТАМ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Курс лекций, который охватывает все темы, выносимые на зачет, создаёт основу для изучения строения вещества. Материал лекций и прочитанное в учебниках закрепляется на коллоквиумах, при написании тестов, контрольных и проверочных работ и анализе ошибок. Каждый аспирант должен добывать часть знаний самостоятельно: подбирать примеры из учебников, пособий и монографий для подтверждения тех или иных положений, выводить математические уравнения, решать задачи.

Рабочей программой дисциплины «Строение вещества» предусмотрена самостоятельная работа аспирантов в объеме 36 часов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение аспирантами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- решение задач;
- написание рефератов;
- работу с Интернет - источниками;
- подготовку к сдаче коллоквиумов, выполнению тестовых заданий и сдаче зачета.

Важное значение имеет раздел курса, посвященный геометрии молекулярных структур. Установлению геометрической конфигурации молекул в настоящее время уделяется большое внимание. Расположением атомов в пространстве определяется доступность реакционных центров в молекуле, наличие или отсутствие внутримолекулярных взаимодействий, величина и направление электрического дипольного момента и т. п., что в свою очередь обуславливает химические и физико-химические свойства вещества. Важную роль изучение строения молекул играет в теоретической химии. Молекулы классифицируют по строению их равновесной конфигурации, относя их к тем или иным группам симметрии. Симметрия волновых функций точно соответствует свойствам симметрии ядерных конфигураций. Зная свойства симметрии волновых функций различных электронных состояний, можно, не прибегая к прямым расчетам, определить переходы от одного состояния в другое и получить представление о характере спектров молекул. По этим свойствам можно судить об условиях (пространственной ориентации, типе возбуждения), в которых возможны реакции между молекулами. Выявление особенностей строения различных молекул углубляет представления о валентных и невалентных взаимодействиях и вносит свой вклад в развитие теории химической связи.

При изучении дисциплины рассматриваются электрические и магнитные свойства молекул и интерпретируются через электронную структуру молекул. Этими свойствами являются дипольный момент, поляризуемость и магнитная восприимчивость. Поляризуемость связана с показателем преломления, оптической активностью и межмолекулярными силами; эти свойства определенным образом связаны с молекулярной структурой.

Особое внимание следует уделить изучению раздела, посвященному молекулярным спектрам. Основная причина появления спектральных линий в случае молекул та же, что и в атомной спектроскопии: когда молекула переходит с одного энергетического уровня на другой, избыток энергии испускается в виде фотона. Различие между молекулярной спектроскопией и атомной спектроскопией состоит в большем разнообразии путей, по которым может изменяться энергия молекулы: энергия может меняться не только при электронных переходах, но и при изменении колебательных и вращательных состояний молекулы. Изучение молекулярного спектра может дать большую информацию о силе связей в молекуле, ее размерах и форме.

Богатая информация, которую можно извлечь из данных молекулярной спектроскопии, по сравнению с атомными спектрами получается за счет того, что молекулярные спектры имеют более сложную структуру и их труднее интерпретировать. Можно получить чисто вращательный спектр, колебательный молекулярный спектр обычно состоит не только из линий, обусловленных изменениями колебательных энергий, но и содержит ли-

нии, соответствующие изменениям вращательных энергий, а электронный молекулярный спектр имеет структуру, обусловленную как колебательными, так и вращательными изменениями. Простейший путь, позволяющий справиться с этой трудностью, состоит в том, чтобы разобрать каждый тип энергетических изменений по очереди, а затем выяснить, как одновременное возбуждение различных типов движения влияет на внешний вид спектров. Все виды спектров связаны некоторыми общими особенностями. Следует обратить внимание на то, каким образом межмолекулярные взаимодействия влияют на свойства веществ.

В последнем разделе рассматривается конденсированное состояние вещества, особенности строения кристаллических и жидких веществ, а также их свойств. Важными вопросами являются вопросы, касающиеся процессов на поверхностях, поскольку именно они определяют большую часть сторон повседневной жизни, включая саму жизнь. Все большее практическое использование находят жидкокристаллические системы.

5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Лабораторные работы не предусмотрены.

6 ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА 6.1 ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
I	Геометрия молекул	З (ОПК-1)-1, У (ОПК-1)-1, В (ОПК-1)-1	ПР-2, УО-2, УО-3
II	Электрические и магнитные свойства молекул	З (ОПК-1)-1, У (ОПК-1)-1, В (ОПК-1)-1	ПР-2, УО-2, УО-3
III	Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул	З (ОПК-1)-1, У (ОПК-1)-1, В (ОПК-1)-1	ПР-2, УО-2, УО-3
IV	Конденсированное состояние	З (ОПК-1)-1, У (ОПК-1)-1, В (ОПК-1)-1	ПР-4, УО-3

Наименование оценочного средства

Устный опрос (УО): собеседование (УО-1), коллоквиум (УО-2), зачет (УО-3), экзамен по дисциплине, модулю (УО-4), итоговый государственный экзамен (УО-5).

Письменные работы (ПР): тесты (ПР-1), контрольные работы (ПР-2), эссе (ПР-3), рефераты (ПР-4), курсовые работы (ПР-5), научно-учебные отчеты по практикам (ПР-6), отчеты по научно-исследовательской работе аспирантов (НИРС) (ПР-7).

Технические средства контроля (ТС): программы компьютерного тестирования (ТС-1), практические задачи (ТС-2), комплексные ситуационные задания (ТС-3).

Информационные системы и технологии (ИС): обучающие тесты (ИС-1), электронные аттестующие тесты (ИС-2), электронный практикум (ИС-3), виртуальные лабораторные работы (ИС-4) и др.

Шифр и название КОМПЕТЕНЦИИ:

ОПК-1: способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА КОМПЕТЕНЦИИ

Тип КОМПЕТЕНЦИИ:

Общепрофессиональная компетенция выпускника программы аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки.

ПОРОГОВЫЙ (ВХОДНОЙ) УРОВНЬ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, ТРЕБУЕМЫЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся, приступивший к освоению программы аспирантуры должен:

- **знать:** цели и задачи научных исследований по направлению деятельности, базовые принципы и методы их организации; основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов;
- **уметь:** составлять общий план работы по заданной теме, предлагать методы исследования и способы обработки результатов, проводить исследования по согласованному с руководителем плану, представлять полученные результаты;
- **владеть:** систематическими знаниями по направлению деятельности; углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки, базовыми навыками проведения научно-исследовательских работ по предложенной теме.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ (ОПК-1) И КРИТЕРИИ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ

Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций), шифр	Критерии оценивания результатов обучения				
	1	2	3	4	5
знать: современные способы использования информационно-коммуникационных	Отсутствие знаний.	Фрагментарные представления о современных способах использования ин-	В целом успешные, но не систематические представления о современных спосо-	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современных способах	Сформированные представления о современных способах использования ин-

технологий в выбранной сфере деятельности. Шифр 3 (ОПК-1)-1		формационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.	бах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.	использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.	формационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности.
уметь: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования. Шифр: У (ОПК-1)-1	Отсутствие умений.	Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи.	В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи.	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи.	Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи.
владеть: навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований. Шифр: В (ОПК-1)-1	Отсутствие навыков.	Фрагментарное применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации.	В целом успешное, но не систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации.	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации.	Успешное и систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации.

6.2 ТЕМЫ КОЛЛОКВИУМОВ

Критерии оценивания

Оценка «отлично»:

- глубокое и прочное усвоение программного материала;
- полные, последовательные, грамотные и логически излагаемые ответы при видоизменении задания;
- свободно справляющиеся с поставленными задачами, знания материала;
- правильно обоснованные принятые решения;
- владение разносторонними навыками и приемами выполнения практических работ.

Оценка «хорошо»:

- знание программного материала;
- грамотное изложение, без существенных неточностей в ответе на вопрос;
- правильное применение теоретических знаний;
- владение необходимыми навыками при выполнении и практических задач.

Оценка «удовлетворительно»:

- усвоение основного материала;
- при ответе допускаются неточности;
- при ответе недостаточно правильные формулировки;
- нарушение последовательности в изложении программного материала;
- затруднения в выполнении практических заданий.

Оценка «неудовлетворительно»:

- незнание программного материала;
- при ответе возникают ошибки;
- затруднения при выполнении практических работ.

Тема: Геометрия молекул

1. Понятие ковалентной связи. Характеристики ковалентной связи. Механизмы образования. Валентность и валентные возможности атомов.
2. σ -, π -, δ - Связи. Кратность связи. Донорно-акцепторное σ - и π - взаимодействие.
3. Интерпретация направленности химических связей в методе валентных связей. Теория гибридизации атомных орбиталей. Недостатки концепции гибридизации как средства описания геометрической структуры молекулы.
4. Делокализованные связи. Метод резонанса. π -Комплексы как пример делокализованной связи.
5. Электронодефицитные и электроноизбыточные молекулы.
6. Ионная связь. Ионная модель и ее ограниченность. Уравнение Борна для ионных молекул. Энергия образования газообразной молекулы с ионной связью.
7. Ненаправленность и ненасыщаемость ионной связи. Координационные числа и структурные типы ионных кристаллических решеток. Роль соотношений ионных радиусов. Уравнение Борна для ионной кристаллической решетки. Константы Маделунга.
8. Поляризация ионов и ее влияние на характер ионной связи. Поляризуемость и поляризующая способность ионов. Правила Фаянса.
9. Металлы и их характерные свойства. Применение метода молекулярных орбиталей для объяснения связей в металлах. Понятие энергетических зон.
10. Зонная теория металлической связи. График зависимости числа разрешенных энергетических состояний от энергии. Проводники. Диэлектрики. Полупроводники.
11. Водородная связь. Энергия водородной связи. Типы водородной связи.
12. Влияние водородной связи на формирование структуры и свойства веществ. Гидраты и клатраты.
13. Каковы особенности строения комплексов переходных металлов с молекулярным азотом?

Тема: Электрические и магнитные свойства молекул

1. Электрический дипольный момент. Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекулы.
2. Парциальные моменты связей и структурных групп. Векторная аддитивная схема расчета дипольных моментов.
3. Экспериментальные методы измерения дипольных моментов.
4. Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный дипольный момент и поляризуемость молекулы.
5. Анизотропия поляризуемости. Средняя поляризуемость. Эллипсоид поляризуемости и симметрия молекул.
6. Связь молекулярных постоянных – дипольного момента и поляризуемости – с макроскопическими характеристиками веществ (диэлектрической проницаемостью и показателем преломления). Уравнение Ланжевена-Дебая для поляризации диэлектрика в статическом поле и поле определенной частоты. Уравнение Клаузиуса-Моссоти. Молярная рефракция.
7. Магнитные свойства электронов.
8. Магнитные свойства ядер.
9. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекулы в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества.
10. Магнитная поляризация. Связь макроскопической характеристики вещества – магнитной проницаемости – с магнитными свойствами молекул.

Тема: Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул

1. Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих. Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии молекулы.
2. Электронные состояния. Потенциальные функции двухатомных молекул и потенциальные поверхности многоатомных молекул.
3. Классификация электронных состояний двухатомных молекул по проекции орбитального момента и спина электронов. Различия свойств молекул в различных электронных состояниях.
3. Свойства симметрии электронных волновых функций двухатомных молекул. Классификация электронных состояний и электронных волновых функций многоатомных молекул.
4. Вращательные состояния. Вращение двухатомной молекулы согласно классической теории в приближении жесткого ротатора.
5. Вращательные состояния многоатомных молекул. Линейные молекулы, молекулы типов сферического, симметричного и асимметричного волчков. Системы вращательных уровней энергии.
6. Вращательные спектры. Микроволновая спектроскопия. Использование в химии.
7. Электронные спектры. Использование электронных спектров в химии.
8. Колебательные состояния. Колебание двухатомной молекулы в приближении гармонического осциллятора.
9. Колебательные состояния двухатомной молекулы в приближении ангармонического осциллятора.
10. Теория малых колебаний многоатомных молекул. Кинетическая и потенциальная энергия, нормальные координаты, нормальные колебания.
11. Характеристичность колебаний, групповые колебания.
12. ИК спектроскопия и ее использование в химии.
13. Спектры комбинационного рассеяния.
14. Микроскопические методы исследования.
15. Дифракционные методы исследования.
16. Методы определения элементного состава.

17. Методы исследования ближнего окружения и окислительного состояния атома.
18. Термоаналитические методы.

6.3 ТЕМЫ РЕФЕРАТОВ

Критерии оценки реферата

Оценка «отлично» ставится, если выполнены все требования к написанию и защите реферата: обозначена проблема и обоснована её актуальность, сделан краткий анализ различных точек зрения на рассматриваемую проблему и логично изложена собственная позиция, сформулированы выводы, тема раскрыта полностью, выдержан объём, соблюдены требования к внешнему оформлению, даны правильные ответы на дополнительные вопросы.

Оценка «хорошо» – основные требования к реферату и его защите выполнены, но при этом допущены недочёты. В частности, имеются неточности в изложении материала; отсутствует логическая последовательность в суждениях; не выдержан объём реферата; имеются упущения в оформлении; на дополнительные вопросы при защите даны неполные ответы.

Оценка «удовлетворительно» – имеются существенные отступления от требований к реферированию. В частности: тема освещена лишь частично; допущены фактические ошибки в содержании реферата или при ответе на дополнительные вопросы; во время защиты отсутствует вывод.

Оценка «неудовлетворительно» – тема реферата не раскрыта, обнаруживается существенное непонимание проблемы.

1. Клатраты: роль водородных связей и межмолекулярных взаимодействий.
2. Супрамолекулярные соединения.
3. Фуллерены.
4. Ферромагнетики.
5. Применение электронных спектров молекул в химии.
6. Применение вращательной (микроволновой) спектроскопии в химии.
7. Применение колебательной спектроскопии в химии.
8. Спектроскопия комбинационного рассеяния.
9. Комплексы переходных соединений с молекулярным азотом: история создания.
10. Жидкокристаллическое состояние вещества.
11. Методы синтеза твердофазных материалов.
12. Методы исследования твердых тел.
13. Аморфные вещества.
14. Структурно нежесткие молекулы.
15. Электронные спектры комплексных соединений.
16. Теория резонанса. Применение теории резонанса для описания делокализованных связей.
17. Гипервалентные связи

6.4 ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ

Критерии оценивания устного ответа на зачете

Оценка «зачтено» выставляется аспиранту, если:

- вопросы раскрыты, изложены логично, без существенных ошибок;
- показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами;
- продемонстрировано усвоение ранее изученных вопросов, сформированность компетенций, устойчивость используемых умений и навыков.

Допускаются незначительные ошибки.

Оценка «не зачтено» выставляется, если:

- не раскрыто основное содержание учебного материала;

- обнаружено незнание или непонимание большей или наиболее важной части учебного материала;
- допущены ошибки в определении понятий, которые не исправлены после нескольких наводящих вопросов;
- не сформированы компетенции, умения и навыки.

1. Описание ковалентной связи в рамках метода валентных связей. σ -, π -, δ - Связи. Кратность связи. Донорно-акцепторное σ - и π - взаимодействие.

2. Интерпретация направленности химических связей в методе валентных связей. Теория гибридизации атомных орбиталей. Недостатки концепции гибридизации как средства описания геометрической структуры молекулы.

3. Делокализованные связи. Метод резонанса. π -Комплексы как пример делокализованной связи.

4. Описание ковалентной связи в рамках метода молекулярных орбиталей. Достоинства и недостатки метода.

5. Электронодефицитные и электроноизбыточные молекулы.

6. Ионная связь. Ионная модель и ее ограниченность. Уравнение Борна для ионных молекул. Энергия образования газообразной молекулы с ионной связью.

7. Ненаправленность и ненасыщаемость ионной связи. Координационные числа и структурные типы ионных кристаллических решеток. Роль соотношений ионных радиусов. Уравнение Борна для ионной кристаллической решетки. Константы Маделунга.

8. Поляризация ионов и ее влияние на характер ионной связи. Поляризуемость и поляризующая способность ионов. Правила Фаянса.

9. Металлы и их характерные свойства. Применение метода молекулярных орбиталей для объяснения связей в металлах. Понятие энергетических зон.

10. Зонная теория металлической связи. График зависимости числа разрешенных энергетических состояний от энергии. Проводники. Диэлектрики. Полупроводники.

11. Понятие равновесной геометрической конфигурации молекулы. Параметры, определяющие геометрию молекулы: межъядерные расстояния и валентные углы. Закономерности в равновесных значениях межъядерных расстояний связанных атомов и валентных углов.

12. Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей (ОЭПВО). Правила Гиллеспи. Отклонения от предсказаний теории ОЭПВО.

13. Дифракция электронов. Электронографический анализ. Сущность метода, возможности и ограничения метода.

14. Дифракция рентгеновских лучей. Сущность метода рентгеноструктурного анализа. Определение геометрических параметров молекул методом рентгеноструктурного анализа. Возможности и ограничения метода.

15. Дифракция нейтронов. Применение дифракции нейтронов для определения геометрических параметров молекул. Возможности и ограничения метода.

16. Нежесткие молекулы. Потенциальные функции нежестких молекул. Физические методы исследования нежестких молекул.

17. Явление внутреннего вращения. Понятие конформации молекулы. Углы внутреннего вращения. Потенциальные барьеры.

18. Политопные перегруппировки. Псевдовращение Бери. Инверсии октаэдрических структур.

19. Таутомерия молекул. Особенности. Примеры.

20. Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы и операции симметрии. Понятие группы. Точечные группы симметрии. Примеры. Применение теории групп в химии.

21. Энергетический критерий возможности существования молекулы. Энергия образования молекул из свободных атомов. Парциальные энергии, сопоставляемые отдель-

ным химическим связям, и понятие энергии разрыва связи. Энергия образования молекулы как сумма энергий, сопоставляемых отдельным связям. Расчет энергии образования молекул полуэмпирическими методами (аддитивная схема).

22. Электрический дипольный момент. Полярные и неполярные молекулы. Дипольный момент и симметрия молекулы.

23. Парциальные моменты связей и структурных групп. Векторная аддитивная схема расчета дипольных моментов. Экспериментальные методы измерения дипольных моментов.

24. Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный дипольный момент и поляризуемость молекулы. Анизотропия поляризуемости. Средняя поляризуемость. Эллипсоид поляризуемости и симметрия молекул.

25. Связь молекулярных постоянных – дипольного момента и поляризуемости – с макроскопическими характеристиками веществ (диэлектрической проницаемостью и показателем преломления). Уравнение Ланжевена-Дебая для поляризации диэлектрика в статическом поле и поле определенной частоты. Уравнение Клаузиуса-Моссоти. Молярная рефракция.

26. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекулы в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества.

27. Магнитная поляризация. Связь макроскопической характеристики вещества – магнитной проницаемости – с магнитными свойствами молекул.

28. Магнитные свойства электронов. Условие электронного парамагнитного резонанса. G-Фактор. Взаимодействие электронов и ядерных спинов, сверхтонкая структура спектров ЭПР. Применение метода ЭПР в химии.

29. Магнитные свойства ядер. Состояния ядер в магнитном поле. Условие ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг, его интерпретация и значение с точки зрения получения структурных данных. Спин-спиновое взаимодействие и тонкая структура спектра ЯМР. Мультиплетность. Константа спин-спинового взаимодействия.

30. Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих. Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии молекулы.

31. Вращательные спектры молекул. Получение экспериментальных значений геометрических параметров молекул. Правила отбора.

32. Колебательные спектры молекул. Гармоническое и ангармоническое приближения. Получение экспериментальных значений энергий диссоциации, силовой постоянной. Правила отбора. Применение ИК спектроскопии в химии.

33. Электронные спектры молекул. Правила отбора. Применение электронной спектроскопии в химии.

34. Водородная связь. Энергия водородной связи. Типы водородной связи.

35. Влияние водородной связи на формирование структуры и свойства веществ. Гидраты и клатраты.

36. Экспериментальные доказательства существования межмолекулярных взаимодействий. Общность физической природы внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий. Приближенное описание межмолекулярных взаимодействий как суммы электростатических, поляризационных, дисперсионных, обменных взаимодействий. Проявление межмолекулярных взаимодействий в свойствах веществ. Понятие о Ван-дер-ваальсовых радиусах.

37. Твердые тела. Кристаллическое состояние. Свойства кристаллов.

38. Геометрическая кристаллография. Классификация форм кристаллов. Симметрия кристаллов. Категории и сингонии. Примеры.

39. Типы кристаллических решеток в зависимости от природы связи (ковалентная, ионная, металлическая, межмолекулярные взаимодействия). Примеры. Свойства веществ с различными типами кристаллических решеток.

40. Кристаллические формы. Явления полиморфизма и изоморфизма. Примеры.
41. Дефекты в кристаллах. Атомные дефекты, примесные дефекты. Нестехиометричность. Линейные и плоские дефекты.
42. Жидкости. Свойства жидкости. Статистическая теория жидкости. Классификация жидкостей.
43. Модельные решеточные теории жидкости: «свободного объема» и «вакансий». Достоинства и недостатки.
44. Аморфное состояние вещества.
45. Мезофазы.

7 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ

1. Мультимедийные презентации по основным разделам дисциплины
2. Ресурсы удаленного доступа: Виртуальный читальный зал РГБ, Лань, РУКОНТ, ПОЛПРЕД, Университетская библиотека, Айбукс.

8 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ

Основная

1. Кнотько А.В. Химия твердого тела / А.В. Кнотько, И.А. Пресняков, Ю.Д. Третьяков. - М.: Издательский центр «Академия», 2007. – 304 с.
2. Пентин, Ю.А. Физические методы исследования в химии / Ю.А. Пентин, Л.В. Вилков. – М.: Мир, ООО «Издательство АСТ», 2009. – 688 с.

Дополнительная

1. Корольков Д.В. Основы теоретической химии. / Д.В. Корольков, Г.А. Скоробогатов. – М.: Издательский центр «Академия», 2007. – 352 с.
2. Корольков, Д.В. Теоретическая химия. В 12 т. / Д.В. Корольков, под ред. Д.В. Королькова. – М.: Академкнига, 2007. – Т. 1: Общие принципы и концепции. – 463 с.
3. Стромберг, А. Г. Физическая химия: учебник для аспирантов, обучающихся по химическим специальностям / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко; под ред. А. Г. Стромберга. – 5-е изд, испр. – М.: Высшая школа, 1999. – 526 с.
4. Хаускрофт, К. Современный курс общей химии. В 2 т.: пер. с англ. / К. Хаускрофт, Э. Констебл. – М.: Мир, 2002. – Т. 1. – 539 с., Т. 2 – 528 с.
5. Шарутина, О.К. Метод молекулярных орбиталей и химическая связь: Учебное пособие / О.К. Шарутина. – Благовещенск: Изд-во БГПУ, 2003. – 177 с.
6. Строение вещества. Строение кристаллов: учебное пособие / А. М. Голубев, А. А. Волков, И. В. Татьяна, В. Н. Горячева. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2010 – 35 с. ЭБС Лань.
7. Ильин, А.П. Химия твердого тела / А.П. Ильин, Н.Е. Гордина. — ИГХТУ (Ивановский государственный химико-технологический университет), 2006. – 216 с.

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

<http://en.edu.ru/>

<http://rcr.ioc.ac.ru/ukh.htm>

http://www.uspkhim.ru/ukh_frm.phtml?jrnid=rc&page=ft

<http://butlerov.com>

9 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА

Общая площадь лаборатории 33,6 м². Площадь на одного обучающегося составляет 4 м².

Материально-техническая база лаборатории включает в себя

учебное (учебно-научное)оборудование: спектрометр атомно-абсорбционный AAnalyst 400, спектрометр рентгенофлуоресцентный Эра-3, спектрометр рентгенофлуоресцентный ARL ADVANT X, спектрометр эмиссионный с индуктивно-связанной плаз-

мой PRODIGY, дифрактометр порошковый рентгеновский ARL XTRA; настольный персональный компьютер, мультимедийная установка, стол письменный, стол для ЛПЗ, стул жёсткий.

ОСОБЕННОСТИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья предусмотрены следующие формы организации педагогического процесса и контроля знаний:

- для слабовидящих:

обеспечивается индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс;

для выполнения контрольных заданий при необходимости предоставляется увеличивающее устройство;

задания для выполнения, а также инструкции о порядке выполнения контрольных заданий оформляются увеличенным шрифтом (размер 16-20);

- для глухих и слабослышащих:

обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости обучающимся предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- для лиц с тяжелыми нарушениями речи, глухих, слабослышащих все контрольные задания по желанию могут проводиться в письменной форме.

Основной формой организации педагогического процесса является интегрированное обучение инвалидов, т.е. все обучающиеся учатся в смешанных группах, имеют возможность постоянно общаться со сверстниками, легче адаптируются в социуме.

Рабочая программа дисциплины разработана на основе:

- ФГОС ВО, утверждённого приказом Министерством образования и науки РФ от 30 июля 2014 г. № 869 «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации)»;
- Учебного плана по направлению подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ, утвержденного Ученым советом БГПУ от «4» июня 2015 г. Протокол № 6;
- Приказа Министерства образования и науки РФ № 1259 от 19.11.2013 г. «Об утверждении порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)»;
- СМК СТО 7.3-2.9.07 – 2015 Положения о программе аспирантуры ФГБОУ ВПО «БГПУ», утвержденного и введенного в действие Решением Ученого совета ФГБОУ ВПО «БГПУ» № 2 от 25 февраля 2015 г.

Разработчик: А.В. Иванов, доктор химических наук, профессор.

10 ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ

Утверждение изменений в рабочей программе дисциплины для реализации в 2015/2016 уч. г.

Рабочая программа дисциплины пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2015/2016 учебном году на заседании кафедры (протокол № 9 от 4 июня 2015 г.).

В рабочую программу дисциплины внесены следующие изменения и дополнения:

№ изменения: 1 № страницы с изменением: 16	
Исключить:	Включить:
	Список литературы и информационных ресурсов. Дополнительная Строение вещества. Строение кристаллов: учебное пособие / А. М. Голубев, А. А. Волков, И. В. Татьяна, В. Н. Горячева. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана.2010 – 35 с. ЭБС Лань.
№ изменения: 2 № страницы с изменением: 17	
Исключить:	Включить:
	Пункт Особенности освоения дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья