

СТЕРЛИТАМАКСКИЙ ФИЛИАЛ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет
Кафедра

Естественнонаучный
Химии и химической технологии

Рабочая программа дисциплины (модуля)

дисциплина

Строение молекулы

Блок Б1, вариативная часть, Б1.В.ДВ.04.02

цикл дисциплины и его часть (базовая, вариативная, дисциплина по выбору)

Направление

18.03.01

Химическая технология

код

наименование направления

Программа

Технология и переработка полимеров

Форма обучения

Заочная

Для поступивших на обучение в
2020 г.

Разработчик (составитель)

к.х.н., доцент

Колчина Г. Ю.

ученая степень, должность, ФИО

Стерлитамак 2022

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)	3
1.1. Перечень планируемых результатов освоения образовательной программы	3
1.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .	3
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы	4
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся	4
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	4
4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)	4
4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)	5
5. Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю).....	10
6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)	10
6.1. Перечень учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	10
6.2. Перечень электронных библиотечных систем, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем	11

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

1.1. Перечень планируемых результатов освоения образовательной программы

Выпускник, освоивший программу высшего образования, в рамках изучаемой дисциплины, должен обладать компетенциями, соответствующими видам профессиональной деятельности, на которые ориентирована программа:

Готовностью использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире (ОПК-3)

Готовностью использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности (ПК-18)

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

Формируемая компетенция (с указанием кода)	Этапы формирования компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
Готовностью использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности (ПК-18)	1 этап: Знания	Обучающийся должен знать: основные понятия, постулаты, модели, номенклатуру, используемые при квантовохимическом описании атомных и молекулярных систем и химических реакций
	2 этап: Умения	Обучающийся должен уметь: осуществлять решения простейших задач о движении частицы
	3 этап: Владения (навыки / опыт деятельности)	Обучающийся должен владеть: навыками применения структурных особенностей органических и неорганических веществ для предсказания их реакционной способности и химических реакций
Готовностью использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире (ОПК-3)	1 этап: Знания	Обучающийся должен знать: фундаментальные понятия и модели современной теории строения вещества при физико-химическом исследовании химических веществ на разных уровнях организации их структуры.
	2 этап: Умения	Обучающийся должен уметь: решать многочисленные задачи в рамках приближения Хюккеля, не требующего громоздких расчетов с применением вычислительной техники, быстро определять тип термов сложных молекул, симметрию колебательных и вращательных состояний и

		разрешенные переходы.
	3 этап: Владения (навыки / опыт деятельности)	Обучающийся должен владеть: использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания о строении вещества.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Курс “Строение молекулы” для студентов предусматривает углубленное изучение теории химической связи и реакционной способности веществ. Данный курс последовательно развивает первоначальные сведения о теории строения вещества, полученные студентами при изучении дисциплины "Общая и неорганическая химия".

Дисциплина изучается на 2 курсе в 3, 4 семестрах

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 72 акад. ч.

Объем дисциплины	Всего часов
	Заочная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины	72
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	6
практических (семинарских)	8
другие формы контактной работы (ФКР)	0,2
Учебных часов на контроль (включая часы подготовки):	3,8
зачет	
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	54

Формы контроля	Семестры
зачет	4

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

№ п/п	Наименование раздела / темы дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)	
		Контактная работа с преподавателем	СР

		Лек	Пр/Сем	Лаб	
3	Реакционная способность молекул	2,5	1	0	18
2.3	Молекулы: электронная оболочка и ядерный остов	0,5	1,5	0	6
2.2	Одно- и многоэлектронные атомы	0,5	1	0	6
3.1	Химическая реакционная способность молекул	1	0	0	6
2.1	Субатомные структуры	1	0	0	6
2	Квантовомеханическая модель молекулы	2	2,5	0	18
1.3	Физические структурные модели	0,5	1	0	6
1.2	Математические структурные модели	0,5	0,5	0	6
1.1	Основные понятия теории структур	0,5	1	0	6
1	Виды структурных моделей	1,5	2,5	0	18
3.2	Молекулы во внешних полях	0,5	1	0	6
3.3	Межмолекулярные взаимодействия и макроструктуры	1	0	0	6
	Итого	6	6	0	54

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)

Курс лекционных занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
3	Реакционная способность молекул	
2.3	Молекулы: электронная оболочка и ядерный остов	<p>Электронная оболочка молекул. Квантово-механическая модель молекулы и ее отношение к классической структурной модели. Типы механических движений в молекулах, разделение ядерных и электронных движений, приближение Борна – Оппенгеймера. Ядерная и электронная составляющие волновой функции молекулы. Понятие о поверхности потенциальной энергии молекулы. Электронная волновая функция, ее построение из одноэлектронных функций, методы ВС и МО. Выбор базисного набора и проблема его оптимизации. Вариант МО ЛКАО. Понятие о неэмпирических и полуэмпирических вариантах метода МО. Метод МО Хюккеля.</p> <p>Орбитальная модель молекулы. Типы молекулярных орбиталей (канонические, локализованные, многоцентровые), их классификация по симметрии, узловой структуре, относительной энергии, заселенности. Электронная конфигурация молекулы. Орбитальные энергии (остовный и резонансный интегралы) и полная энергия молекулы (кулоновские и обменные интегралы), понятие о конфигурационном взаимодействии. Расчет</p>

		<p>молекулярных характеристик в методе МО: электронная плотность и заряд атома, порядки связей, поляризуемости, индексы свободной валентности. Ядерный остов молекул. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Топология молекулы, топологические графы и матрицы. Пространственная конфигурация (форма) молекулы и ее определение, метод ОЭПВО. Структурно-нежесткие молекулы. Флуктуации структуры и их типы: таутомерные переходы, инверсии (пирамидальные, циклические, плоские), псевдовращения, конформационные повороты. ППЭ и химические формы. Спиновые состояния ядерного остова молекулы. Построение и оптимизация спиновых волновых функций молекулы, понятие о спин-гамильтониане. Принципы ЯМР- спектроскопии. Колебания и вращения молекул. Колебательные и вращательные стационарные состояния, их энергии и квантовые числа. Модель нормальных колебаний. Взаимодействие с окружающей средой, колебательные и вращательные суммы по состояниям.</p>
2.2	Одно- и многоэлектронные атомы	<p>Одноэлектронный атом. Стационарные состояния атома водорода. Волновые функции, их типы, узловая структура и симметрия, комплексное и действительное представление, радиальная и угловая части. Электронное облако, его форма и плотность. Наблюдаемые атома: энергия, орбитальный и спиновой моменты и их проекции, полный механический момент и его проекции, их допустимые значения. Квантовые числа (главное, орбитальное, спиновое, магнитное орбитальное и магнитное спиновое, квантовые числа полного механического момента). Многоэлектронные атомы (МЭА). Состав и типы взаимодействий в МЭА. Одноэлектронное приближение и орбитальная модель. Принцип Паули, электронная конфигурация. Построение глобальной волновой функции из атомных спин-орбиталей в виде определителя Слэтера. Понятие о методах оптимизации АО: метод самосогласованного поля, эффективный потенциал и Хартри-фоковские АО, приближение центрального поля, модель Слэтера – Зенера. Глобальные характеристики МЭА. Орбитальные энергии и полная электронная энергия, кулоновские и обменные интегралы. Механические моменты: орбитальный, спиновой и полный, их квантовые числа, спин-орбитальное взаимодействие, LS- и jj-модели. Атомные термы, их обозначения. Расщепление термов за счет межэлектронных и спин-орбитальных взаимодействий, влияние слабого и сильного внешнего магнитного поля.</p>
3.1	Химическая реакционная способность молекул	<p>Химические реакции. Механическая модель элементарного химического акта (ЭА): траектория ЭА, энергетический профиль, потенциальный барьер, энергетический эффект и энергия активации. Вероятность ЭА и скорость химической реакции. Реакционная способность молекул, индексы реакционной способности. Адиабатические и</p>

		неадиабатические реакции. Принцип сохранения орбитальной симметрии. Методы Вудворда – Хоффмана, Фукуи, Дьюара – Циммермана.
2.1	Субатомные структуры	Характеристики и классификация элементарных частиц: лептоны и кварки, цветовые взаимодействия, барионы и мезоны. Взаимные превращения элементарных частиц, законы сохранения. Античастицы. Атомные ядра. Характеристики ядер (нуклонный состав, зарядовое и массовое число, спин и магнитный момент, квадрупольный момент). Изотопы и изобары. Ядерные силы, их особенности, проблема стабильности ядер. Понятие об оболочечной модели ядра, энергетические уровни. Ядерная спектроскопия (ЯГР, ЯМР, ЯКР) и ее применение в химии. Ядерные реакции (α -распад, электронный и позитронный - распады, К-захват, деление, синтез). Законы сохранения в ядерных реакциях.
2	Квантовомеханическая модель молекулы	
1.3	Физические структурные модели	Свободная частица, частица в одномерном и трехмерном потенциальном ящике, плоский ротатор, одномерный гармонический осциллятор, многомерный осциллятор и метод нормальных колебаний, системы с двумя состояниями (на примере молекулярного иона водорода) и квантовомеханический резонанс. Волновые функции стационарных состояний и допустимые значения наблюдаемых для каждой модели. Статистические системы и их классификация: закрытые (отсутствие контактов с термостатом и резервуарами частиц), термостатированные (термический контакт с термостатом), открытые (диффузионный контакт с резервуаром частиц). Статистический ансамбль, его разновидности (микрканонический, канонический, большой канонический), статистические суммы, температура и химический потенциал
1.2	Математические структурные модели	Точечные группы симметрии (ТГС) молекул: элементы и операции симметрии, групповая операция (композиция), таблица умножения группы, классификация ТГС. Классы эквивалентности и типы симметрии (неприводимые представления), их номенклатура, таблицы характеров. Физико-химические приложения ТГС: классификация и построение молекулярных орбиталей и нормальных колебаний, правила отбора и др.
1.1	Основные понятия теории структур	Теоретические способы описания свойств и строения веществ. Континуально-эмпирические и корпускулярно-структурные теории. Структурный подход (структурализм) и структурные задачи. Основные понятия теории структур: частицы, взаимодействия, структуры, упорядоченность. Структурные уровни, их иерархия. Общие (инвариантные) свойства структур. Математический и физико-химический структурализм. Моделирование как метод науки о строении вещества. Физико-химические и математические модели. Ограниченность и другие особенности структурных моделей.

1	Виды структурных моделей	
3.2	Молекулы во внешних полях	Постоянное электрическое поле: индукционная и ориентационная поляризуемость молекул. Постоянное магнитное поле: магнитная восприимчивость, диа- и парамагнетизм молекул. Переменные поля: резонансные взаимодействия, молекулярная спектроскопия, ее типы и химические приложения, нерезонансные взаимодействия (рассеяние, преломление, вращение плоскости поляризации и другие эффекты). Применение в элементном и структурном химическом анализе.
3.3	Межмолекулярные взаимодействия и макроструктуры	Межмолекулярные взаимодействия, их типы и особенности. Структурирование макросистем. Равновесные структуры. Кристаллические и аморфные структуры, промежуточные типы. Описание геометрических и электронно-энергетических характеристик. Поверхность, особенности ее строения и свойств. Дефекты, их типы. Релаксационные процессы в макросистемах. Микроскопический механизм и направление релаксации. Релаксационные уравнения. Время релаксации и релаксационный спектр. Диссипативные структуры (ДС). Условия образования. Типы ДС: пространственные, временные, волновые. Устойчивость ДС, принцип Пригожина. Детерминированные и случайные характеристики ДС. Квантовые эффекты в макросистемах: сверхтекучесть, сверхпроводимость, ферромагнетизм.

Курс практических/семинарских занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
3	Реакционная способность молекул	
2.3	Молекулы: электронная оболочка и ядерный остов	<p>Методы построения электронной волновой функции молекулы: ВС и МО. Описание молекулы водорода методом ВС: резонансные формы и их волновые функции. Оптимизация коэффициентов суперпозиции: учет пространственной и перестановочной симметрии. Стационарные состояния. Вычисление полной энергии молекулы, энергетическая диаграмма. Атомные, кулоновские и обменные интегралы. Использование урезанных базисов, теория резонанса и ее использование в химии.</p> <p>Описание молекулы водорода методом МО: молекулярные спин-орбитали и электронные конфигурации молекулы. Глобальные волновые функции стационарных состояний с учетом пространственной симметрии. Вычисление полной энергии молекулы и орбитальных энергий. Орбитальные, кулоновские и обменные интегралы. Глобальная энергетическая диаграмма. Одноэлектронные интегралы — остовный и резонансный, корреляционная диаграмма. Учет конфигурационного взаимодействия. Сравнение методов ВС и МО. Метод МО Хюккеля: принятые приближения. Нахождение коэффициентов хюккелевских МО и их</p>

		энергий для линейных полиенов и аннуленов. Анализ эффектов сопряжения и ароматичности. Вычисление молекулярных характеристик: заряды атомов, порядки связей, индексы свободной валентности, поляризуемости).
2.2	Одно- и многоэлектронные атомы	Одноэлектронный атом. Стационарные состояния атома водорода. Волновые функции, их типы, узловая структура и 9 симметрия, комплексное и действительное представление, радиальная и угловая части. Электронное облако, его форма и плотность. Наблюдаемые атома: энергия, орбитальный и спиновой моменты и их проекции, полный механический момент и его проекции, их допустимые значения. Квантовые числа (главное, орбитальное, спиновое, магнитное орбитальное и магнитное спиновое, квантовые числа полного механического момента). Многоэлектронные атомы (МЭА). Атомные термы, их обозначения. Правила Хунда. Расщепление термов за счет межэлектронных и спин-орбитальных взаимодействий, влияние слабого и сильного внешнего магнитного поля.
2	Квантовомеханическая модель молекулы	
1.3	Физические структурные модели	Свободная частица, частица в одномерном и трехмерном потенциальном ящике, плоский ротатор, одномерный гармонический осциллятор, многомерный осциллятор и метод нормальных колебаний, системы с двумя состояниями (на примере молекулярного иона водорода) и квантовомеханический резонанс. Волновые функции стационарных состояний и допустимые значения наблюдаемых для каждой модели. Статистический ансамбль: статистические суммы, температура и химический потенциал.
1.2	Математические структурные модели	Математические структуры: элементы и алгебраические операции. Точечные группы симметрии (ТГС) молекул: элементы и операции симметрии, групповая операция (композиция), таблица умножения группы, классификация ТГС. Классы эквивалентности и типы симметрии (неприводимые представления), их номенклатура, таблицы характеров. Физико-химические приложения ТГС: классификация и построение молекулярных орбиталей и нормальных колебаний, правила отбора и др.
1.1	Основные понятия теории структур	Структурные задачи и их типы. Основные понятия теории структур: частицы, взаимодействия, структуры, упорядоченность. Структурные уровни, их иерархия. Математический и физико-химический структурализм. Физико-химические и математические структурные модели. Ограниченность и другие особенности структурных моделей.
1	Виды структурных моделей	
3.2	Молекулы во внешних полях	Постоянное электрическое поле: индукционная и ориентационная поляризуемость молекул. Постоянное магнитное поле: магнитная восприимчивость, диа- и парамагнетизм молекул. Переменные поля: резонансные взаимодействия, молекулярная спектроскопия, ее типы и химические приложения, нерезонансные взаимодействия

	(рассеяние, преломление, вращение плоскости поляризации и другие эффекты). Применение в элементном и структурном химическом анализе. Колебания ядерного остова. Модель гармонического осциллятора. Колебания многоатомных молекул, модель нормальных колебаний, формы нормальных колебаний и их симметрия. Возбуждение колебательных переходов и колебательная спектроскопия. Вращения молекул. Модель плоского ротатора. Момент инерции и вращательная постоянная. Понятие о моделях волчков. Возбуждение вращательных переходов и вращательная спектроскопия.
--	---

5. Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Перечень тем, рекомендуемых для самостоятельного изучения:

Раздел 1. Виды структурных моделей

1. Основные типы кристаллических решёток.
2. Атомные и молекулярные кристаллические решётки.
3. Основные типы кристаллических решёток. Кристаллическая фаза.

Раздел 2. Квантовомеханическая модель молекулы

4. Типы химической связи в кристалле.
5. Сингонии.
6. Аллотропные модификации на соединений серы, фосфора, углерода.

Раздел 3. Реакционная способность молекул

7. Метод рентгеноструктурного анализа.
8. Строение вещества в расплаве.
9. Спектроскопия ИК и КР.

Список учебно-методических материалов:

1. Колчина, Г.Ю. Строение вещества: учеб. пособие для студ. "04.03.01-Химия", профиль "Высокомолекулярные соединения", "18.03.01-Химическая технология", профиль "Технология и переработка полимеров"/ Г.Ю. Колчина; МОинРФ; СФ БашГУ; Под ред. А.А. Богомазовой и др.. - Стерлитамак: Изд-во СФ БашГУ, 2016. - 109 с. - 30 экз.
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студ. вузов / В. Г. Цирельсон. - М.: БИНОМ, 2010. - 496 с.: цв. ил. - (Учебник для высшей школы). - (В пер.). - 14 экз.
3. Глинка, Н.Л. Общая химия: учеб. пособие для студ. вузов / Н. Л. Глинка; ред. В.А. Попкова, А.В. Бабкова. - 18-е изд., перераб. и доп. - М. : Юрайт, 2011. – 886 с.: ил. - (Основы наук). - (В пер.). - 12 экз.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

6.1. Перечень учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная учебная литература:

1. Колчина, Г.Ю. Строение вещества: учеб. пособие для студ. "04.03.01-Химия", профиль "Высокомолекулярные соединения", "18.03.01-Химическая технология", профиль "Технология и переработка полимеров"/ Г.Ю. Колчина; МОинРФ; СФ БашГУ; Под ред. А.А. Богомазовой и др. - Стерлитамак: Изд-во СФ БашГУ, 2016. - 109 с. - 30 экз.

2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студ. вузов / В. Г. Цирельсон. - М.: БИНОМ, 2010. - 496 с.: цв. ил. - (Учебник для высшей школы). - (В пер.). - 14 экз.

Дополнительная учебная литература:

1. Глинка, Н.Л. Общая химия: учеб. пособие для студ. вузов / Н.Л. Глинка; ред. В.А. Попкова, А.В. Бабкова. - 18-е изд., перераб. и доп. - М. : Юрайт, 2011. – 886 с.: ил. - (Основы наук). - (В пер.). - 12 экз.

6.2. Перечень электронных библиотечных систем, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

№ п/п	Наименование документа с указанием реквизитов
-------	---