

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)



Проректор
По учебно-методической работе
А.А. Панфилов
«16» апреля 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Элементы строения вещества

Направление подготовки – 04.03.01 – Химия

Профиль подготовки

Уровень высшего образования: бакалавриат

Форма обучения – очная

Семестр	Трудоём- кость зач. ед. (час.)	Лекций, час.	Практич. занятий, час.	Лаборат. работ, час.	СРС, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачёт)
3	4 (144)	36	18	-	45	экзамен (45)
Итого	4 (144)	36	18	-	45	экзамен (45)

Владимир, 2015

Мед.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Элементы строения вещества» являются ознакомление студентов с современным состоянием науки о строении вещества, как одного из главных разделов физической химии; формирование химического мировоззрения на основе современных представлений о строении молекул, твёрдых, жидких и газообразных тел.

Задачи курса. Глубокое понимание основ теории строения атомов и молекул, природы химической связи и движущих причин химической реакции стало в настоящее время отправным пунктом при изучении практически любого физико-химического курса в университетах и химико-технологических вузах. Кроме овладения основами теории химической связи, общего ознакомления с формальным аппаратом и терминологией, возникает необходимость более тесного знакомства с конкретными расчётными схемами, критического понимания их реальных возможностей и ограничений. От студента требуется не только усвоение общих идей и принципов теории строения атомов и молекул (что, конечно, остаётся важнейшей задачей), но и их активное применение, приложение к актуальным, в том числе ещё не полностью решённым задачам теоретической химии. Такая задача, которая некоторое время назад казалась нереальной в условиях вузовского преподавания, становится сейчас разрешимой и подкрепляется значительным расширением программ соответствующих обязательных учебных курсов.

В программе на основе краткого изложения общих вопросов теории строения атомов и молекул и основ теории стереохимии и строения молекул координационных соединений рассмотрены вопросы строения конденсированных фаз, таких, как жидкие, аморфные и мезофазы. В силу наличия специализированных курсов строение кристаллов и межфазных поверхностей рассматривается в общих чертах.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Элементы строения вещества» изучается в базовой части учебного плана.

Перечень дисциплин, необходимых для успешного изучения дисциплины «Элементы строения вещества».

1. Неорганическая химия.
2. Органическая химия.
3. Физика (молекулярная физика, физика конденсированного состояния).
4. Философия (категории и законы материалистической диалектики, теория познания).

Освоение дисциплины «Элементы строения вещества» необходимо как предшествующее для изучения следующих дисциплин:

1. Физическая химия (некоторые разделы).

2. Коллоидная химия.
3. Физико-химические методы анализа.
4. Специальные дисциплины (такие как химия полимеров, физика полимеров, полимерное материаловедение, физическая химия стеклообразного состояния и др.).

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции:

- способность к самоорганизации и самообразованию (ОК-7);
- владение системой фундаментальных химических понятий (ПК-3);
- способность получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5).

В результате освоения данной дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

1) Знать:

- Основы современных представлений о квантовом строении молекул (ОК-7, ПК-3, ПК-5).
- Симметрию молекулярных систем (ОК-7, ПК-3, ПК-5).
- Основные электрические и магнитные свойства молекул (ОК-7, ПК-3, ПК-5).
- Основы межмолекулярного взаимодействия (ОК-7, ПК-3, ПК-5).
- Строение конденсированных фаз, в том числе – жидкостей и аморфных веществ (ОК-7, ПК-3, ПК-5).

2) Уметь:

- Классифицировать молекулярные системы по элементам симметрии с определением точечной группы (ОК-7, ПК-3, ПК-5).
- Предсказывать строение и основные электрические и магнитные свойства молекул по их дипольному моменту, показателю преломления и оптической активности (ОК-7, ПК-3, ПК-5).
- Предсказывать поведение фаз исходя из представлений о межмолекулярном взаимодействии (ОК-7, ПК-3, ПК-5).

3) Владеть:

- Основными методами описания квантового строения молекул (ОК-7, ПК-3, ПК-5).
- Описанием симметрии молекулярных систем по Шёнфлису (ОК-7, ПК-3, ПК-5).
- Основными методами определения дипольного момента, показателя преломления и

оптической активности молекул (ОК-7, ПК-3, ПК-5).

- Основными принципами теоретического описания строения конденсированных фаз (ОК-7, ПК-3, ПК-5).

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачётные единицы, 144 часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Вид учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах).						Объем учебной работы с применением интерактивных методов (в часах.%)	Формы контроля успеваемости (по неделям семестра). Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	Контрольные работы	СРС	КП/КР		
1	Основы современной теории химического строения	3	1-2	4	2			5			
2	Квантовые состояния молекул	3	3-4	2	-			5			Рейтинг-контроль № 1
3	Симметрия молекулярных систем	3	5-9	16	10			18		16/62	
4	Электрические и магнитные свойства молекул	3	10-11	4	2			8		2/33	
5	Межмолекулярные взаимодействия	3	12-13	4	-			8		2/50	Рейтинг-контроль. № 2
6	Строение жидкостей и аморфных веществ	3	14-15	4	4			8		2/25	
7	Обзор основных результатов по изучению строения молекул	3	16-17	2	-			2		2/50	Рейтинг-контроль № 3
	Всего			36	18			45		24/45	Экзамен (45)

СОДЕРЖАНИЕ КУРСА

Введение

Общий обзор методов теоретического и экспериментального изучения строения молекул и строения вещества.

Часть I. Строение молекул

1. Основы современной теории химического строения

Основные положения квантовой механики. Строение одноэлектронных и многоэлектронных атомов.

2. Состояния молекул

Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.

3. Симметрия молекулярных систем

Элементы и операции симметрии ядерной конфигурации молекулы. Точечные группы симметрии. Понятие о представлениях групп и характерах представлений.

Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей.

Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение (дипольный момент и моменты инерции, форму нормальных колебаний, вырождение состояний, сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях и т.п.). Орбитальные корреляционные диаграммы.

4. Электрические и магнитные свойства молекул

Постоянные внешние электрическое и магнитное поля. Дипольный момент и поляризуемость молекул, магнитный момент и магнитная восприимчивость молекул. Парамагнетизм молекул.

Показатель преломления. Рефракция. Оптическая активность.

5. Межмолекулярные взаимодействия

Диполь-дипольное взаимодействие. Дисперсионные силы и формула Лондона. Межмолекулярный потенциал Леннарда-Джонса. Постоянная Маделунга. Молекулярные пучки. Структура жидкостей. Вязкость.

Ван-дер-Ваальсовы силы. Водородная связь.

6. Обзор основных результатов по изучению строения молекул

Полиядерные комплексные соединения. Хелаты.

Органические соединения. Полиэдраны. Фуллерены. Элементарноорганические соединения. Металлоцены. Клатраты. Ротаксаны и катенаны. Полимеры и биополимеры. Белки.

Часть II. Строение конденсированных фаз

7. Строение жидкостей и аморфных веществ

Современные методы описания структуры жидкостей. Функции радиального распределения. Специфика аморфного состояния.

8. Строение мезофаз

Определение мезофаз. Методы изучения их структуры Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.). Жидкокристаллическое состояние в биологических системах.

Заключение

Учение о строении вещества – основа современных воззрений химии.

ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

1. Основные положения квантовой механики.
2. Структурная и пространственная изомерия.
3. Симметрия молекулярных систем. Точечные группы симметрии.
4. Симметрия молекулярных систем. Классификация по точечным группам.
5. Электрические и магнитные свойства молекул. Дипольный момент и поляризуемость молекул, магнитный момент и магнитная восприимчивость молекул. Парамагнетизм молекул. Показатель преломления. Рефракция. Оптическая активность.
6. Межмолекулярные взаимодействия. Диполь-дипольное взаимодействие. Молекулярные пучки. Структура жидкостей. Вязкость. Ван-дер-Ваальсовы силы. Водородная связь.
7. Строение жидкостей и аморфных веществ. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Специфика аморфного состояния.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Изложение теоретического материала осуществляется с применением электронных средств обучения.

Некоторые разделы теоретического курса рассматриваются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задание на изучение нового материала до его изложения на лекции.

Для оценки освоения теоретического материала студентами используются письменные контрольные работы и устный опрос.

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

Вопросы для рейтинг-контроля:

Рейтинг-контроль №1

1. Основные положения теории строения Бутлерова.
2. Виды изомерии.
3. Общий обзор методов теоретического и экспериментального изучения строения молекул и строения вещества.
4. Основы современной теории химического строения.
5. Основные положения квантовой механики. Строение одноэлектронных и многоэлектронных атомов.
6. Состояния молекул.
7. Равновесные конфигурации молекул.
8. Структурная изомерия.
9. Оптические изомеры.
10. Структура и спектр атомарного водорода. Атомные орбитали. Радиус Бора.
11. Гомоядерные двухатомные молекулы. Симметрия орбиталей.
12. Гетероядерные двухатомные молекулы. Электроотрицательность.

Рейтинг-контроль №2

1. Элементы симметрии и операции симметрии E , C_n , i .
2. Элементы симметрии и операции симметрии σ , S_n .
3. Точечные группы Шёнфлиса. Группы C_1 , C_s , C_i , C_n .
4. Точечные группы Шёнфлиса. Группы C_{nv} , C_{nh} , S_n .
5. Точечные группы Шёнфлиса. Группы D_n , D_{nh} , D_{nd} .
6. Точечные группы Шёнфлиса. Группы T , O , R_3 .
7. Порядок классификации по точечным группам.
8. Групповое умножение. Свойства групп.
9. Матричное представление трансформаций.
10. Характер операций симметрии.

Рейтинг-контроль №3

1. Дипольный момент и поляризуемость молекул.
2. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекул. Парамагнетизм молекул.
3. Показатель преломления. Рефракция.
4. Оптическая активность.
5. Межмолекулярные взаимодействия.
6. Уравнение Дебая.
7. Методика определения дипольного момента μ и поляризуемости α по плотности ρ и диэлектрической проницаемости ϵ .
8. Поляризуемость при высоких частотах. Рефракция.
9. Уравнение Лоренца-Лорентца.
10. Методика определения электронной поляризуемости $\alpha_{эл}$ по плотности ρ и показателю преломления n .
11. Аддитивные свойства рефракции.
12. Ориентационное, индукционное и дисперсионное взаимодействие.
13. Жидкие кристаллы. Аморфное состояние.

Контрольные задания для самостоятельной работы студентов:

1 раздел. Выберите правильные ответы:

1. Молекулы каких веществ способны к ориентационным взаимодействиям:
CO, H₂, He, H₂O, HCl, S₈, P₄, Cl₂?
2. Какие из веществ способны к образованию водородных связей:
CH₄, NH₃, H₂, CH₃CH₂OH, CH₃COOH, CH₃OCH₃, CaH₂?
3. Какие из веществ образуют кристаллы ионного типа:
HCl, I₂, KI, NaBr, Na, Cu, CaO, CaCO₃?

2 раздел. Вставьте пропущенные слова:

4. Ван-дер-ваальсовы силы бывают трех типов: ..., ..., и
5. ... силы проявляются во всех случаях, для любых веществ.
6. Ориентационные взаимодействия имеют место в случае ... молекул.
7. Водородные связи возникают между молекулами, содержащими атомы водорода, соединенные с атомами высокой
8. Наличие не только ближнего, но и дальнего порядка отличает ... тела от ...

9. Частицы, расположенные в узлах ... кристаллической решетки, связаны ван-дер-ваальсовыми силами.

10. В узлах кристаллической решетки ионного типа расположены ...

11. Наименее механически прочны и наиболее легкоплавки кристаллы с ... типом решетки.

12. Так как ширина запрещенной зоны для кристалла алмаза составляет 7 эВ, алмаз является ...

3 раздел. Ответьте на вопросы:

13. Расположите формулы следующих веществ: Cl_2 , HCl , CCl_4 в порядке возрастания роли ориентационных сил в межмолекулярных взаимодействиях.

14. Расположите формулы веществ: NH_3 , H_2O , HF в порядке возрастания энергии водородной связи.

15. Какое из изомерных соединений: $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$ или $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$ имеет более высокую температуру кипения? Почему?

Ответы на вопросы для самопроверки

1 раздел.

1. Полярные молекулы: CO , H_2O , HCl .

2. Соединения, в которых атомы элементов большой электроотрицательности связаны с атомами водорода: NH_3 , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, CH_3COOH .

3. Соединения, в которых связаны атомы сильно различающейся электроотрицательности ($\Delta\chi > 2$): KI , NaBr .

2 раздел.

4.... дисперсионные, ориентационные и индукционные.

5. Дисперсионные...

6. ...полярных...

7. ...электроотрицательности.

8. ...кристаллические... аморфных.

9. ... молекулярной...

10. ... ионы.

11. ... молекулярным...

12. ... диэлектриком.

3 раздел.

13. HCl , CCl_4 , Cl_2 .

14. Энергия водородной связи тем больше, чем больше разница электроотрицательностей водорода и второго элемента. Порядок возрастания энергии связи: $\text{HF} > \text{H}_2\text{O} > \text{NH}_3$.

15. В этаноле $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$. в отличие от диметилового эфира CH_3OCH_3 , имеет место водородная связь (см. 2 вопрос I уровня). Поэтому температура кипения этанола выше.

Экзаменационные вопросы

1. Основные положения теории строения Бутлерова.
2. Виды изомерии.
3. Структура и спектр атомарного водорода. Атомные орбитали. Радиус Бора.
4. Гомоядерные двухатомные молекулы. Симметрия орбиталей. Гетероядерные двухатомные молекулы. Электроотрицательность.
5. Элементы симметрии и операции симметрии E, C_n, i, σ, S_n .
6. Точечные группы Шёнфлиса. Группы $C_1, C_s, C_i, C_n, C_{nv}, C_{nh}, S_n, D_n, D_{nh}, D_{nd}, T, O, R_3$.
7. Порядок классификации по точечным группам. Групповое умножение. Свойства групп.
8. Матричное представление трансформаций. Характер операций симметрии.
9. Дипольный момент. Диэлектрическая проницаемость. Поляризация.
10. Электрическая восприимчивость. Поляризуемость.
11. Уравнение Дебая. Методика определения дипольного момента μ и поляризуемости α по плотности ρ и диэлектрической проницаемости ϵ .
12. Поляризуемость при высоких частотах. Рефракция. Уравнение Лоренца-Лорентца. Методика определения электронной поляризуемости $\alpha_{эл}$ по плотности ρ и показателю преломления n . Аддитивные свойства рефракции.
13. Магнитная восприимчивость. Магнитный дипольный момент. Постоянный магнитный момент. Фазовые переходы парамагнетиков при понижении температуры. Влияние внешнего магнитного поля.
14. Ориентационное, индукционное и дисперсионное взаимодействие.
15. Отталкивание и суммарное вандерваальсово взаимодействие. Водородная связь.
16. Структура жидкостей. Жидкие металлы. Молекулярные жидкости. Жидкости с водородными связями. Вода.
17. Жидкие кристаллы.
18. Аморфное состояние.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Основная литература:

1. Новиков А.Ф. Строение вещества (Электронные оболочки атомов. Химическая связь. Конденсированное состояние вещества). Издательство: НИУ ИТМО. 2013. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=71093.
2. Михайленко Ю.А., Мезенцев К.В. Строение и реакционная способность веществ: учебное пособие. Издательство: КузГТУ имени Т.Ф. Горбачева. 2013. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=6643.
3. А.М. Голубев и др. Строение вещества. Задачи для защиты модуля 1 по курсу химии : метод. Указания. М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2013. www.studentlibrary.ru

Дополнительная литература:

1. А.М. Голубев, А.А. Волков, И.В. Татьяна, В.Н. Горячева. Строение вещества. Строение кристаллов : учеб. Пособие. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. www.studentlibrary.ru.
2. А.А. Гуров, Ф.З. Бадаев, П.В. Слитиков. Строение вещества : метод. указания к выполнению лабораторной работы по курсу «Общая химия». М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. www.studentlibrary.ru.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы.

1. <http://www.scirus.com/>
2. <http://www.ihtik.lib.ru/>
3. <http://www.y10k.ru/books/>
4. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
5. <http://www.sciencedirect.com>
6. <http://chemteq.ru/lib/book>
7. <http://www.chem.msu.su/rus>
8. <http://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
9. <http://www.elsevier.com/>
10. <http://www.uspkhim.ru/>
11. <http://www.strf.ru/database.aspx>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

При чтении лекционного курса используются мультимедийные средства обучения в виде набора слайдов с демонстрацией через проектор.

На практических занятиях и лекциях используются наглядные пособия в виде моделей.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки – 04.03.01 – “Химия” (бакалавриат)

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.

Рецензент

А.В. Стрельников научный сотрудник ООО “БМТ”
Стрельников А.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 7/1 от 14.04. 2015 г.

Заведующий кафедрой *Кухтин*

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 04.03.01 – “Химия”

Протокол № 7/1 от 16.04. 2015 г.

Председатель комиссии *Кухтин*

Программа переутверждена:

на 2015/2016 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.15 года
Зав. кафедрой *Кухтин*

на 2016/2017 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1/1 от 5.09.16 года
Зав. кафедрой *Кухтин*

на 2017/2018 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.17 года
Зав. кафедрой *Кухтин*

на 2018/2019 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 30.09.18 года
Зав. кафедрой *Кухтин*

на _____ учебный год. Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года
Зав. кафедрой _____