

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Строение вещества

по направлению подготовки / специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) подготовки / специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

химик-специалист, преподаватель

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

БК-1. Способен применять общие и специализированные компьютерные программы при решении задач профессиональной деятельности;

ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений в различных областях химии;

ОПК-2. Способен проводить синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследовать процессы с их участием;

ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РОБК 1.1 Знает правила и принципы применения общих и специализированных компьютерных программ для решения задач профессиональной деятельности

РООПК 1.1 Знает теоретические основы неорганической, органической, физической и аналитической химии, применяет их при решении профессиональных задач в других областях химии.

РООПК 1.2 Умеет систематизировать и интерпретировать результаты экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии

РООПК 1.3 Умеет грамотно формулировать заключения и выводы по результатам работы

РООПК 2.2 Знает теоретические основы методов изучения состава, структуры и свойств для грамотного выбора метода исследования

РООПК 3.1 Знает основы теоретической физики, математического анализа и квантовой химии; основные теоретические и полуэмпирические модели, применяемые при решении задач химической направленности

РООПК 3.2 Умеет решать расчетно-теоретические задачи химической направленности по разработанным методикам, использовать аппарат теоретической химии и физики для грамотной интерпретации полученных результатов

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоение студентами фундаментальных и практических навыков исследований молекул и молекулярных систем современными физическими и физико-химическими методами;

– Научиться применять понятийный аппарат для решения задач в области изменения свойств веществ в зависимости от строения образующих их микрочастиц и воздействия внешних условий;

– Научиться устанавливать взаимосвязь между строением вещества, его физико-химическими свойствами и реакционной способностью.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Шестой семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия, физическая химия, квантовая химия, физика и математический анализ.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 з.е., 180 часов, из которых:

-лекции: 32 ч.

-практические занятия: 48 ч.

в том числе практическая подготовка: 48 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Раздел 1. Физические методы исследования строения вещества (лекции)

Тема 1. Классификация физических методов исследования

Краткое содержание темы. Приведены типы классификации физических методов, прямая и обратная задача методов, характеристическое время метода.

Тема 2. Спектроскопические методы.

Краткое содержание темы. Приведена теория взаимодействия света с веществом. Представлены вращательная спектроскопия (микроволновая спектроскопия), колебательная спектроскопия (ИК и КР-спектроскопия), электронная спектроскопия. Основы получения и интерпретация спектров, получение информации о строении и свойствах вещества по спектрам поглощения.

Тема 3. Резонансные методы исследования.

Краткое содержание темы. Основы резонансных методов, классификация. Ядерный магнитный резонанс. Электронный парамагнитный резонанс. Основы получения и интерпретации резонансных спектров.

Тема 4. Масс-спектрометрия.

Краткое содержание темы. Основы процессов ионизации, типы ионов, типы современных масс спектрометров. Основы получения и интерпретация масс-спектров.

Тема 5. Дифракционные методы исследования.

Краткое содержание темы. Основы дифракционных методов, рентгеновское излучение, закон Брэгга. Основы получения и интерпретация рентгенограмм.

Раздел 1. Физические методы исследования строения вещества (практики)

Тема 1. Дипольный момент, поляризуемость.

Краткое содержание темы. Основные понятия, виды поляризуемости. Решение задач по нахождению поляризуемости, дипольного момента с использованием уравнений Дебая, Клазиуса-Моссотти, Лоренца-Лоренца.

Тема 2. Спектроскопические методы.

Краткое содержание темы. Рассмотрение основ молекулярной спектроскопии, решение задач на вращательные спектры (определение геометрических параметров молекул), колебательные спектры (нахождение силовых постоянных, фундаментальных частот поглощения, энергии диссоциации) и электронные спектры (нахождение экстинкции, концентраций растворов, квантового выхода).

Раздел 2. Строение вещества (лекции)

Тема 1. Типы химических частиц.

Краткое содержание темы. Молекулы, ионы, свободные радикалы. Их признаки и свойства. Примеры относительно стабильных радикалов.

Тема 2. Метод фотоэлектронной спектроскопии.

Краткое содержание темы. Общий вид фотоэлектронного спектра. Происхождение структуры фотоионизационных полос. Адиабатический и вертикальный потенциалы ионизации. Теорема Купманса. Границы ее применимости.

Тема 3. Нежесткие молекулы.

Краткое содержание темы. Временной фактор при определении структуры молекул. Характеристическое время (или временное разрешение) метода. Примеры таутомерных превращений.

Тема 4. Туннельный механизм превращений структурно нежестких молекул.

Краткое содержание темы. Условие преобладающего вклада туннелирования. Влияние симметрии потенциального барьера на вероятность туннелирования. Зависимость потенциальной энергии молекулы от инверсионной координаты. Политопные перегруппировки. Зависимость спектра ЯМР нежестких молекул от температуры.

Тема 5. Методы исследования структурно нежестких молекул.

Краткое содержание темы. Аллогональные изомеры. Спиновые изомеры. Электронная природа структурной нежесткости. Нежесткие координаты. Стереохимически и электронно нежесткие системы. Вид волновой функции для электронно нежестких систем. Оптические изомеры или энантиомеры – частный случай стереоизомеров. Особенности строения хиральных молекул.

Тема 6. Нанохимия. Свойства наночастиц.

Краткое содержание темы. Методы исследования наночастиц. Наночастицы на основе углерода. Фуллерены – новые аллотропные модификации углерода. ИК-, КР-спектры фуллеренов и их электронные спектры поглощения. Окисление фуллеренов. Главные факторы, определяющие особенности связи в каркасных и циклических структурах. Соединения включения. Углеродный наноматериал графен. Нанотрубки.

Тема 7. Супрамолекулярная химия.

Краткое содержание темы. Структурные единицы супрамолекулы. Типы взаимодействий между компонентами супрамолекул. Активные компоненты супрамолекулы. Новые свойства супрамолекул. Процессы, обеспечивающие функционирование супрамолекулярных устройств. Способы управления молекулярными устройствами и машинами.

Раздел 2. Строение вещества (практики)

Тема 1. Краткое содержание темы. ИК-спектроскопия. Валентные и деформационные колебания. Характеристические частоты. Способы получения спектров. Расшифровка спектров. КР-спектроскопия. Методы получения спектров. Совместная расшифровка ИК- и КР-спектров.

Тема 2. Краткое содержание темы. Протонный парамагнитный резонанс. Шкала химических сдвигов. Решение задач на обнаружение количества сигналов. Спин-спиновое взаимодействие. Решение задач на установление строения молекул по ПМР-спектрам.

Тема 3. Краткое содержание темы. Структурная масс-спектроскопия. Природа и получение масс-спектров. Молекулярный ион. Пути фрагментации молекул. Решение задач установления структуры молекул по данным масс-спектров.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, проведения контрольных работ и выполнения домашних заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее двух раз в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в шестом семестре проводится в устной форме по билетам, проверяющим РООПК 1.1, РООПК 2.2 и РООПК3.1. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Обе части экзамена предполагают развернутые устные ответы на вопросы по разделу 1

«Физические методы исследования строения вещества», вторая часть – по разделу 2 «Строение вещества». Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Примерный перечень теоретических вопросов:

Раздел 1. Физические методы исследования строения вещества

Вопрос 1. Микроволновые спектры. Модель жесткого ротатора. Момент инерции, приведенная масса. Энергия вращательного движения жесткого ротатора. Выражение момента инерции для двухатомной молекулы.

Вопрос 2. Резонансные методы. Классификация резонансных методов. Общее представление о магнитном резонансе. Выражение для энергии в ЯМР. Принципы и условия получения ЯМР спектра.

Раздел 2. Строение вещества

Вопрос 1. Общий вид фотоэлектронного спектра. Происхождение структуры фотоионизационных полос. Адиабатический и вертикальный потенциалы ионизации

Вопрос 2. Типы химических частиц. Молекулы, ионы, свободные радикалы. Их признаки и свойства. Примеры относительно стабильных радикалов. Причины их сравнительной устойчивости. Методы исследования свободных радикалов. Факторы, усложняющие исследование строения радикальных частиц.

Актуальный перечень теоретических вопросов приведен ОМД «Строение вещества», а также в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23524>

Студент имеет право проходить промежуточную аттестацию вне зависимости от результатов текущей (при условии демонстрации практических навыков, соответствующих РОБК 1.1, РООПК 1.2, РООПК 1.3, РООПК 3.2).

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» выставляется студенту в случае полного безошибочного ответа с правильным применением понятий и определений, при демонстрации понимания на дополнительные вопросы.

Оценка «хорошо» выставляется студенту в случае правильного и достаточно полного ответа, не содержащего существенных ошибок, и при демонстрации понимания на дополнительные и наводящие вопросы.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту в случае недостаточно полного объема ответа, наличия ошибок и пробелов в знаниях при ответе на теоретические вопросы.

Оценке «неудовлетворительно» соответствуют неполные и поверхностные ответы, указывающие на отрывочные знания. При ответах на дополнительные и наводящие вопросы допускает существенные ошибки, демонстрирует отсутствие понимания материала.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23524>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План семинарских и практических занятий.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы.

д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Основы молекулярной спектроскопии / К. Н. Бенуэлл. – М.: Мир, 1985. – 384 с.

URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000062450/000062450.djvu>.

- Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии / Л. В. Вилков [и др.]. – М.: Мир, АСТ, 2003. – 683 с. URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000208638/000208638.pdf>.
- Драго Р. Физические методы в химии: В 2-х т. / Р. Драго. М.: Мир, 1981. – 422 с.
- Введение в курс "Физические методы исследования в химии": учебное пособие / О. К. Базыль – Томск: Изд-во ТГУ, 2016. – 130 с. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000539001>.
- Применение ИК и ПМР спектроскопии при изучении строения органических молекул: учебно-методическое / Л. Г. Самсонова. – Томск : Изд-во Том. ун-та, 2016. – 60 с. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000530173>.
- Сергеев Г.Б. Нанохимия. Глава 4. Криохимия атомов и наночастиц металлов. - М.: Изд-во МГУ, 2003. URL: <https://www.chem.msu.ru/rus/books/2001-2010/sergeev-nano/nano4.pdf>
- б) дополнительная литература:
 - Пентин Ю. А. Основы молекулярной спектроскопии / Ю. А. Пентин [и др.]. – М.: Мир, БИНОМ, 2008. – 398 с.
 - Молекулярная спектроскопия: Учебные пособия для вузов / Мальцев А. А. – М.: Московский университет, 1980. – 270 с.
 - Введение в молекулярную спектроскопию: Учебное пособие для химических факультетов университетов, химико-технологических и педагогических институтов / Н. Г. Бахшиев. – Л.: Издательство Ленинградского университета, 1987. – 215 с.
 - Спектроскопия / Ю. Бёккер. – М.: ТЕХНОСФЕРА, 2009. – 527 с.
 - Infrared and Raman spectroscopy in Forensic science, Ed by J. M. Chalmers. John Wiley & Sons, Ltd., 2012. – p.612
 - Infrared Spectroscopy / J. M. Tompson. – Pan Stanford Publishing Pte. Ltd. 2018. – p.196.
 - Wörner H. J., Merkt F. Fundamentals of Electronic Spectroscopy In book: Handbook of High-resolution, 2011. DOI: 10.1002/9780470749593.hrs069.
 - Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы / Ж.-М. Лен. – Новосибирск: Наука. Сиб. предприятие РАН, 1998. – 334 с.
 - Губин С. П. Графен и родственные формы углерода / С. П. Губин [и др.]. – М.: Ленанд, 2014. – 101 с.
 - Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И. П. Суздаев. – М.: Книжный дом ЛИБРОКОМ, 2013. – 589 с.
 - Минкин В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин [и др.]. – Ростов-на Дону: «Феникс», 1997. – 560 с.
 - Фуллерены: Учебное пособие / Л. Н. Сидоров [и др.]. – М.: Изд-во «Экзамен». 2005. – 688 с.
 - Нанохимия / Г. Б. Сергеев. – М.: Изд-во МГУ, 2003. – 286 с.
 - Mingsheng Xu, Tao Liang, Minmin Shi, Hongzheng Chen. Graphene-Like Two-Dimensional Materials // Chem. Rev. 2013, 113, 3766–3798 dx.doi.org/10.1021/cr300263a
 - Perry T. Yin, Shreyas Shah, Manish Chhowalla Ki-Bum Lee. Design, Synthesis, and Characterization of Graphene–Nanoparticle Hybrid Materials for Bioapplications // Chem. Rev. 2015, 115, 2483–2531 DOI: 10.1021/cr500537t.

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
 - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).
- б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ –
<http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ –
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных (*при наличии*):

– ChemSpider бесплатная база данных химических структур –
<https://www.chemspider.com/>

– Спектральная база данных для органических соединений –
https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

1. Фахрутдинова Елена Данияровна, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

2. Соколова Ирина Владимировна, д-р физ.-мат. наук, профессор, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, профессор.

3. Самсонова Любовь Гавриловна, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.