Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»
Институт сельского хозяйства и природных ресурсов

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИСХПР
_____ А.М. Козина
«30» мая 2017 г.

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Учебный модуль по специальности
04.05.01 – фундаментальная и прикладная химия

Рабочая программа

СОГЛАСОВАНО
Начальник учебного отдела
_____ Л.Б. Даниленко

«29» мая 2017 г.

Разработали
зав. кафедрой ФПХ
_____ И.В. Зыкова
старший преподаватель кафедры ФПХ
_____ В.А. Исаков
«25» мая 2017 г.

Принято на заседании кафедры
Протокол № 9 от 26.05 2017 г.
Заведующий кафедрой
_____ И.В. Зыкова
«26» мая 2017 г.

1 Цели и задачи учебного модуля

Цель учебного модуля (УМ) состоит в том, чтобы сформировать у студентов способность использовать теоретические основы строения веществ при решении профессиональных задач

Задачи УМ:

1. формирование системы знаний о базовых принципах теории строения молекул, лежащих в основе современной теории связи физических и химических свойств молекул в основном и возбужденном состояниях;
2. овладение умением использовать современные теоретические представления о строении вещества для объяснения физико-химических явлений и их прогнозирования;
3. овладение приемами использования методов теоретического изучения строения молекул и веществ.

2 Место учебного модуля в структуре ОП специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная химия

Учебный модуль «Строение вещества» изучается в 5 семестре, входит в базовую часть ОП специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная химия.

Изучение дисциплины базируется на знаниях, полученных при изучении математики, физики, неорганической, аналитической, физической и органической химии.

В процессе освоения курса «Строение вещества» студенты готовятся к изучению следующих дисциплин: химическая технология, коллоидная химия, физические методы исследований, квантовая химия, кристаллохимия, современная химия и химическая безопасность.

3 Требования к результатам освоения учебного модуля

Процесс изучения УМ направлен на формирование компетенции:

способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);

способностью воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1).

В результате освоения УМ студент должен знать, уметь и владеть:

Код компетенции	Уровень освоения компетенции	Знать	Уметь	Владеть
ОК-1	базовый	различные способы обобщения, анализа и восприятия информации.	отбирать, анализировать и обобщать необходимую информацию, теоретические положения, факты, источники.	навыками культуры мышления, готовностью к анализу, обобщению и отбору актуальной информации, фактов, теоретических положений.
ОПК-1	повышенный	теоретические основы современных представлений о строении молекулярных систем, о природе химической связи и движущих причинах химических реакций; строение конденсированных фаз (жидкостей, аморфных веществ, кристаллов, мезофаз) и их поверхностей; основы классической теории химического строения; основы квантово-механического описания молекулярных систем, основы теории симметрии молекулярных систем; основные составляющие межмолекулярных взаимодействий; основы методов экспериментального и теоретического исследования структуры вещества.	устанавливать связи физических и химических свойств молекул с их строением в основном и возбужденным состояниях; использовать результаты современных исследований в области строения вещества для объяснения физико-химических явлений или их прогнозирования, определять структурные характеристики молекул из спектроскопических данных; определять роль межмолекулярных взаимодействий в различных физиико-химических процессах; выявлять и использовать взаимосвязь строения конденсированных фаз с их свойствами.	качественными методами определения пространственного и электронного строения молекул и комплексов; приемами определения геометрии молекул и комплексов на основе теории групп, концепции гибридизации атомных орбиталей, на основе теории отталкивания электронных пар валентных орбиталей.

4 Структура и содержание учебного модуля

4.1 Трудоемкость учебного модуля

В структуре УМ выделены учебные элементы модуля (УЭМ) в качестве самостоятельных разделов.

Учебная работа (УР)	Всего	Распределение по семестрам	Коды формир-х компет-й
		6	
Трудоемкость модуля в зачетных единицах (ЗЕТ)	4	4	
Распределение трудоемкости по видам УР в академических часах (АЧ):			
Введение			
- лекции	2	2	ОК-1; ОПК-1
- практические занятия	2	2	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	1	1	
- внеаудиторная СРС	4	4	
УЭМ 1 Классическое и квантово-механическое описание строения молекулярных систем			
- лекции	16	16	ОК-1; ОПК-1
- практические занятия	16	16	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	11	11	
- внеаудиторная СРС	32	32	
УЭМ 2 Симметрия молекулярных систем			
- лекции	4	4	ОК-1; ОПК-1
- практические занятия	2	2	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	1	1	
- внеаудиторная СРС	4	4	
УЭМ 3 Невалентные взаимодействия в молекулярных системах			
- лекции	2	2	ОК-1; ОПК-1
- практические занятия	4	4	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	2	2	
- внеаудиторная СРС	8	8	
УЭМ 4 Основные результаты исследования строения молекул и молекулярных систем			
- лекции	2	2	ОК-1; ОПК-1
- практические занятия	6	6	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	5	5	
- внеаудиторная СРС	4	4	
УЭМ 5 Строение конденсированных фаз и их поверхностей			
- лекции	10	10	ОК-1; ОПК-1
- практические занятия	6	6	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	2	2	
- внеаудиторная СРС	2	2	
Аттестация: дифференцированный зачет			

4.2 Содержание и структура разделов учебного модуля

Введение

Историческая ретроспектива основных теорий строения вещества. Общий обзор методов экспериментального и теоретического изучения строения молекул и строения веществ.

УЭМ 1 Классическое и квантово-механическое описание строения молекулярных систем

1.1 Основы классической теории строения молекул. Модель молекулы в классической теории химического строения (равновесная конфигурация, эффективные атомы, валентность, единицы сродства, химические связи и взаимодействия непосредственно не связанных атомов). Основные постулаты. Геометрическая конфигурация молекулы, ее основные параметры и элементы симметрии. Связь строения и свойств вещества (средних энергетических, электрических, оптических и др.).

1.2 Основы квантовой механики в приложении к молекулярным системам. Основные постулаты. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Приближение Борна-Оппенгеймера. Одноэлектронные уравнения для молекул (метод Хартри-Фока, приближение МО ЛКАО, уравнения Рутаана), метод валентных связей.

1.3 Электронное строение молекул. Молекулярные орбитали (интерференция атомных орбиталей, условия формирования МО). Типы МО (связывающие, разрыхляющие, несвязывающие, σ-, π-, δ- и φ-МО, g- и u-МО). Орбитальные корреляционные диаграммы. Электронные конфигурации двухатомных молекул. Молекулярные термы. Электронные переходы в двухатомных молекулах. Многоатомные молекулы (локализованные и гибридизованные МО). Модели локализации электронов.

1.4 Спектры и строение молекул. Электронно-колебательно-вращательные состояния молекул. Общие основы правил отбора для спектров испускания, поглощения и рассеяния. Электронно-колебательно-вращательные спектры двухатомных молекул. Колебательно-вращательные спектры поглощения двухатомных молекул. Вращательные спектры поглощения двухатомных молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением.

УЭМ 2 Симметрия молекулярных систем

2.1 Точечная симметрия молекулярных систем. Типы симметрии (точечная и трансляционная). Операции и точечные группы симметрии. Представления групп и характеры представлений.

2.2 Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение: дипольный момент и моменты инерции, форма нормальных колебаний, вырождение состояний, сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях и т.п.

УЭМ 3 Невалентные взаимодействия в молекулярных системах

Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства веществ.

УЭМ 4 Основные результаты исследования строения молекул и молекулярных систем

Химическая связь в координационных соединениях переходных металлов. Полиядерные комплексные соединения. Хелаты.

УЭМ 5 Строение конденсированных фаз и их поверхностей

5.1 Структурная классификация конденсированных фаз. Жидкости, аморфные вещества, мезофазы, кристаллы. Идеальные кристаллы, кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Жидкие кристаллы и другие мезофазы. Аморфные вещества. Жидкости. Особенности строения полимерных фаз.

5.2 Строение жидкостей и аморфных веществ. Мгновенная и колебательно-усредненная структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Современные методы описания структуры жидкостей. Флуктуации и корреляционные функции. Специфика аморфного состояния.

5.3 Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мицеллообразование и строение мицелл.

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

5.5 Поверхности конденсированных фаз. Особенности строения поверхности кристаллов и жидкостей. Структура границы раздела конденсированных фаз. Молекулы и кластеры на поверхности; структура адсорбционных слоев.

4.3 Содержание практических занятий

№ раздела УМ	Наименование практических работ	Трудоемкость, ак.час
Введение	1. Термин «строение вещества» и его трактовка	2
1	1. Химический аспект классической теории строения молекул 2. Физический аспект классической теории строения молекул 3. Двухатомные молекулы 4. Многоатомные молекулы 5. Электронные и колебательные состояния молекул 6. Спектры и строение молекул	4 2 2 4 2 2
2	1. Точечная симметрия молекулярных систем	2
3	1. Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	4
4	1. Основные результаты исследования строения молекул и молекулярных систем	6
5	1. Структура простых жидкостей и строение кристаллов	6

4.4 Организация изучения учебного модуля

Методические рекомендации по организации изучения УМ с учетом использования в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения учебных занятий даются в Приложении А.

5 Контроль и оценка качества освоения учебного модуля

Контроль качества освоения студентами УМ и его составляющих осуществляется непрерывно в течение всего периода обучения с использованием балльно-рейтинговой системы (БРС), являющейся обязательной к использованию всеми структурными подразделениями университета.

Для оценки качества освоения модуля используются формы контроля: текущий – регулярно в течение всего семестра; рубежный – на девятой неделе семестра; семестровый – по окончании изучения УМ.

Оценка качества освоения модуля осуществляется с использованием фонда оценочных средств, разработанного для данного модуля, по всем формам контроля в соответствии с положением от 25.03.2014 Протокол УС № 18 «Об организации учебного процесса по образовательным программам высшего образования».

Содержание видов контроля и их график отражены в технологической карте учебного модуля (Приложение Б).

6 Учебно-методическое и информационное обеспечение учебного модуля представлено **Картой учебно-методического обеспечения** (Приложение В)

7 Материально-техническое обеспечение учебного модуля

Для проведения лекционных и практических занятий необходима аудитория, оборудованная мультимедийной техникой для демонстрации презентаций и видеоматериалов.

Приложения (обязательные):

А – Методические рекомендации по организации изучения учебного модуля

Б – Технологическая карта

В – Карта учебно-методического обеспечения УМ

Приложение А

Методические рекомендации по организации изучения учебного модуля «Строение вещества»

Методические рекомендации устанавливают порядок и методику изучения теоретического и практического материала учебного модуля. Методические рекомендации составляются по каждому виду учебной работы, включенные в модуль. Методические рекомендации должны нацеливать студента на творческую самостоятельную работу, не должны подменять учебную литературу и справочники, давать готовых решений поставленных перед студентом задач.

Для достижения планируемых результатов обучения, в курсе «Строение вещества» используются различные образовательные технологии:

1. *Информационно-развивающие технологии*, направленные на овладение большим запасом знаний, запоминание и свободное оперирование ими. Используется самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации.

2. *Деятельностные практико-ориентированные технологии*, направленные на формирование системы профессиональных практических умений при выполнении практических работ, обеспечивающих возможность качественно выполнять профессиональную деятельность.

3. *Развивающие проблемно-ориентированные технологии,* направленные на формирование и развитие проблемного мышления, мыслительной активности, способности видеть и формулировать проблемы, выбирать способы и средства для их решения. Используются виды проблемного обучения: коллективная мыслительная деятельность в группах при выполнении практических работ, решение задач повышенной сложности.

4. *Личностно-ориентированные технологии обучения,* обеспечивающие в ходе учебного процесса учет различных способностей обучаемых, создание необходимых условий для развития их индивидуальных способностей, развитие активности личности в учебном процессе. Личностно-ориентированные технологии обучения реализуются в результате индивидуального общения преподавателя при выполнении индивидуальных практических работ.

Методические рекомендации по теоретической части учебного модуля

Учебный элемент модуля	Форма проведения
Введение	Лекция обзорная, семинар с выполнением контрольной работы по индивидуальному заданию
УЭМ 1 Классическое и квантово-механическое описание строения молекулярных систем	Лекция классическая, лекция проблемная**,** семинар с выполнением контрольной работы по индивидуальному заданию и задания в тестовой форме
УЭМ 2 Симметрия молекулярных систем	Лекция классическая, лекция проблемная**,** семинар с выполнением контрольной работы по индивидуальному заданию
УЭМ 3 Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	Лекция обзорная, семинар с выполнением контрольной работы по индивидуальному заданию и работы по информации, полученной в сообщениях по отдельным вопросам темы

УЭМ 4 Основные результаты исследования строения молекул и молекулярных систем	Лекция обзорная, семинар с выполнением контрольной работы по индивидуальному заданию и работы по информации, полученной в сообщениях по отдельным вопросам темы
УЭМ 5 Строение конденсированных фаз и их поверхностей	Лекция обзорная, контрольная работа по индивидуальному заданию, сообщения по отдельным вопросам темы

Аудиторная самостоятельная работа

1 Выполнение заданий и решение задач, в том числе индивидуальных заданий для текущего контроля, по темам практических занятий «Термин «строение вещества» и его трактовка», «Химический аспект классической теории строения молекул», «Двухатомные молекулы», «Многоатомные молекулы», «Спектры и строение молекул», «Точечная симметрия молекулярных систем», «Невалентные взаимодействия в молекулярных системах», «Структура простых жидкостей и строение кристаллов».

2 Изучение материала и составление соответствующего конспекта по темам практических занятий «Физический аспект классической теории строения молекул», «Электронные и колебательные состояния молекул», «Структура простых жидкостей и строение кристаллов».

3 Систематизация информации, полученной в виде сообщений (с презентациями) путем заполнения таблиц по темам практических занятий «Невалентные взаимодействия в молекулярных системах», «Основные результаты исследования строения молекул и молекулярных систем».

4 Выполнение заданий в тестовой форме для текущего контроля теоретических знаний и составление заданий в форме закрытого теста по разделам УЭМ 1 «Классическое и квантово-механическое описание строения молекулярных систем».

Внеаудиторная самостоятельная работа

1 Подготовка к практическим занятиям по темам «Химический аспект классической теории строения молекул», «Двухатомные молекулы», «Многоатомные молекулы», «Спектры и строение молекул», «Точечная симметрия молекулярных систем», «Невалентные взаимодействия в молекулярных системах», «Структура простых жидкостей и строение кристаллов».

2 Выполнение индивидуальных контрольных заданий (домашних работ по индивидуальным заданиям) по темам практических занятий «Термин «строение вещества» и его трактовка», «Химический аспект классической теории строения молекул», «Двухатомные молекулы», «Многоатомные молекулы», «Спектры и строение молекул», «Точечная симметрия молекулярных систем», «Невалентные взаимодействия в молекулярных системах», «Основные результаты исследования строения молекул и молекулярных систем».

3 Подготовка к заданиям в тестовой форме для текущего контроля теоретических знаний по темам курса «Классическое описание строения молекулярных систем», «Квантово-механическое описание строения молекулярных систем».

4 Подготовка сообщения (с презентацией) по вопросу в теме практического занятий «Невалентные взаимодействия в молекулярных системах», «Основные результаты исследования строения молекул и молекулярных систем».

5 Подготовка, написание реферата, подготовка к его презентации и защите по теме, предложенной студентом, или выбранной из тем, предложенных преподавателем.

Приложение Б

Технологическая карта
учебного модуля «Строение вещества»
семестр *5*, ЗЕТ *4*, вид аттестации *дифференцированный зачет*, акад.часов *72*, баллов рейтинга *200*

№ и наименование раздела учебного модуля, КП/КР	№ недели сем.	Трудоемкость, ак.час					Форма текущего контроля успев. (в соотв. с паспортом ФОС)	Максим. кол-во баллов рейтинга
		Аудиторные занятия				СРС		
		ЛЕК	ПЗ	ЛР	АСРС			
Введение	1	2	2		1	4	ПР-1 ДР-1	4 6
УЭМ 1 Классическое и квантово-механическое описание строения молекулярных систем	2-9	16	16		11	32		
1.1 Основы классической теории строения молекул	2-4	6	6		4	12	ПР-2, ПР-3 ДР-2, ДР-3	16 8
1.2 Основы квантовой механики в приложении к молекулярным системам	5	2	2		1	4	ПР-4 ДР-4	4 6
1.3 Электронное строение молекул	6-7	4	4		3	8	ПР-5 ДР-5, ДР-6	8 12
1.4 Спектры и строение молекул	8-9	4	4		3	8	ПР-6, ПР-7 ДР-7 Тест	16 8 12
Рубежная аттестация	**1-9**	**18**	**18**		**12**	**36**		**100**
УЭМ 2 Симметрия молекулярных систем	10-11	4	2		1	4		
2.1 Точечная симметрия молекулярных систем	10	2	2		1	2	ПР-8 ДР-8	4 6
2.2 Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение	11	2				2		
УЭМ 3 Невалентные взаимодействия в молекулярных системах	11-12	2	4		2	8	ПР-9 ДР-9 Доклад	6 4 10
УЭМ 4 Основные результаты исследования строения молекул и молекулярных систем	13-14	2	6		5	4	ПР-10 ДР-10 (Доклад)	14 4 (10)

УЭМ 5 Строение конденсированных фаз и их поверхностей	15-18	10	6		2	2		
5.1 Структурная классификация конденсированных фаз	15	2						
5.2 Строение жидкостей и аморфных веществ	15	2						
5.3 Структура простых жидкостей	16	2	2		2	2	ПР-11	12
5.4 Строение мезофаз	17	2	2					
5.5 Поверхности конденсированных фаз	18	2	2					
							Реферат	40
Итого за курс								**200**

В соответствии с Положением «Об организации учебного процесса по образовательным программам высшего образования» перевод баллов рейтинга в традиционную систему оценок осуществляется по шкале:

за девятую неделю:

отлично – 90-100; хорошо – 70-89; удовлетворительно – 50-69; неудовлетворительно – менее 50

за курс:

отлично – 180-200; хорошо – 140-179; удовлетворительно – 100-139; неудовлетворительно – менее 100

Приложение В

Карта учебно-методического обеспечения

Учебного модуля «Строение вещества»

Специальность *04.05.01 – фундаментальная и прикладная химия*

Формы обучения *очная*

Курс *3* Семестр *5*

Часов**:** всего *144*, лекций *36*, практических занятий *36*, СРС *72*

Обеспечивающая кафедра фундаментальной и прикладной химии

Таблица 1- Обеспечение учебного модуля учебными изданиями

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
Учебники и учебные пособия		
1 Бердетт Дж. Химическая связь / Дж.Бердетт; пер. с англ. – М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 245 с.	12	
2 Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В.Г.Цирельсон. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 496 с.	13	
3 Банкер Филип, Симметрия молекул и спектроскопия = Molecular symmetry and spectroscopy: учеб. пособие / Пер.с англ.:Ю.Н.Панченко и др.,под ред.Н.Ф.Степанова. - 2-е изд., перераб. - М. : Мир:Научный мир, 2004. - 763с.	1	
4 Папулов Ю. Г., Строение молекул : учеб. пособие для студентов вузов / Ю. Г. Папулов ; Твер. гос. ун-т [и др.]. - 3-е изд., перераб. и доп. - Тверь, 2008. - 233 с.	1	
Учебно-методические издания		
1 Зыкова И.В., Исаков В.А., Рабочая программа учебного модуля «Строение вещества» для специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная химия. – Великий Новгород: НовГУ, 2016. – 13 с.	http://www.novsu.ru/study/umk/university/r.1180151.ksort.spec_shifr/i.1180151/?spec=&showfolder=1222273	

Таблица 2 – Информационное обеспечение учебного модуля

Название программного продукта, интернет-ресурса	Электронный адрес	Примечание
Спектральная база данных органических соединений (Spectral Database for Organic Compounds SDBS)	http://sdbs.db.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi	

Таблица 3 – Дополнительная литература

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
1. Папулов Ю. Г., Строение молекул : учеб. пособие для хим. спец. ун-тов / Ю. Г. Папулов ; Твер. гос. ун-т. - 2-е изд., перераб. - Тверь, 1995. - 200 с	1	
2. Минкин В. И., Теория строения молекул : учеб. пособие для вузов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с.	21	

Действительно для 2017/2018 учебного года. Зав. кафедрой ФПХ _____ И.В. Зыкова
протокол № 11 от 29.06.2017

Действительно для 2018/2019 учебного года. Зав. кафедрой ФПХ _____ И.В. Зыкова
протокол № 13 от 28.06.2018

Действительно для 2019/2020 учебного года. Зав. кафедрой ФПХ _____ И.В. Зыкова
протокол № 11 от 22.06.2019

Действительно для 2020/2021 учебного года
протокол № 11 от 03.07.2020
Зав. каф. ФПХ _____ И.В. Зыкова