

УдмФИЦ УрО РАН

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

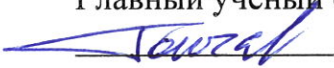
**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«УДМУРТСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
Уральского отделения Российской академии наук»**

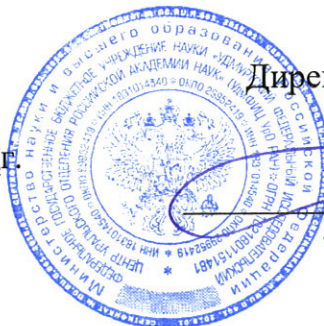
ОДОБРЕНО

Объединенным ученым советом
УдмФИЦ УрО РАН

Протокол № 3 от «15» апреля 2022г.

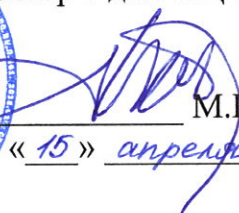
Главный ученый секретарь, к.х.н.

 О.Ю. Гончаров



УТВЕРЖДАЮ

Директор УдмФИЦ УрО РАН,
д.ф.-м.н.

 М.Ю. Альес

«15» апреля 2022г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Физическая химия I. Строение вещества и химическая связь

2022

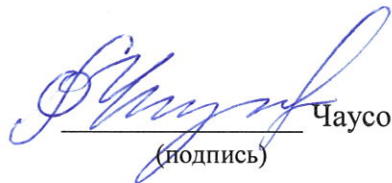
Ижевск

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности

1.4.4. Физическая химия
(шифр и наименование специальности)

Разработчик:

Ведущий научный сотрудник, д.х.н.


Чаясов Ф. Ф.
(подпись)

Согласовано:

Заместитель директора
по естественно-научному направлению


А.И. Коршунов
(подпись)

Зав. аспирантурой, к.ф.-м.н.


М.Ю. Лебедева
(подпись)

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Физическая химия I. Строение вещества и химическая связь» является формирование и развитие у аспирантов компетенций в области общих и специфических особенностей физико-химических процессов превращения веществ, а также знаний и умений в области теоретических и основ применения физико-химических методов в материаловедении.

В процессе достижения цели ставятся следующие **задачи**:

- изучить предмет и задачи специальности «Физическая химия» и получить систематические знания о строении вещества;
- изучить историю развития физической химии, вклад российских учёных в формирование современных представлений, и современное состояние физической химии;
- изучить современные представления о структуре вещества, элементарных частицах и атомах;
- изучить современные теории химической связи и строение атомно-молекулярных систем;
- изучить строение жидких и твёрдых тел, включая разупорядочение в конденсированных фазах.

2. МЕСТО ПРОГРАММЫ В СТРУКТУРЕ ПРОГРАММЫ АСПИРАНТУРЫ

Учебная дисциплина «Физическая химия I. Строение вещества и химическая связь» входит в образовательный компонент подготовки аспирантов по научной специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

Для изучения данной дисциплины необходимы знания по физике и химии в объеме программы высшего образования.

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данного курса, необходимы при подготовке к сдаче кандидатского экзамена и написании диссертационной работы.

3. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

По окончании изучения дисциплины «Физическая химия I. Строение вещества и химическая связь» аспиранты должны:

Знать:

- основные принципы использования современных методов исследования в области физической химии;
- современные тенденции и основные направления исследований в развитии физической химии;
- основные подходы и методы проведения теоретических и экспериментальных исследований в области физической химии с использованием современного оборудования и передовых технологий;
- дифракционные методы анализа (монокристалльный и порошковый рентгеноструктурный анализ, нейтронографию).

Уметь:

- анализировать современную научную информацию, современные базы данных и формировать литературный обзор по теме своих исследований;
- пользоваться современными приборами и методами исследований структуры вещества;
- проводить исследования строения веществ, материалов, изделий современными методами, правильно обрабатывать и интерпретировать результаты исследований.

Владеть: современными методами отбора и подготовки образцов и проведения исследований строения веществ, материалов, изделий, обработки и интерпретации экспериментальных данных.

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Физическая химия I. Строение вещества и химическая связь» составляет 4 зачетные единицы (144 академических часов).

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения программы аспирантуры

Вид учебной работы		Всего акад. часов	Курс			
			1	2	3	4
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>						
В том числе						
Лекции (ЛК)		34	34			
Практические/семинарские занятия (ПЗ)		–	–			
<i>Самостоятельная работа обучающихся (СР), ак.ч.</i>		126	126			
Подготовка реферата		14	14			
<i>Контроль (форма контроля)</i>		<i>зачёт</i>	<i>зачёт</i>			
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	160	160			
	зач.ед.	4	4			

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Разделы дисциплины и виды занятий

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
Раздел 1. Предмет и объекты физической химии	1. История физической химии. Вклад отечественных учёных в развитие современных представлений. Предмет, объекты и методы современной физической химии.	ЛК
Раздел 2. Строение вещества	2. Основы классической теории химического строения. Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.	ЛК
	3. Физические основы учения о строении молекул. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шрёдингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой. Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и	ЛК

	термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация. Электронная корреляция в атомах и молекулах. Её проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия. Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.	
	4. Симметрия молекулярных систем. Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей. Электронное приближение. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.	ЛК
	5. Электрические и магнитные свойства. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.	ЛК
	6. Межмолекулярные взаимодействия. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия. Основные результаты и закономерности в строении молекул. Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Строение основных типов органических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.	ЛК
	7. Строение конденсированных фаз. Структурная классификация конденсированных фаз. Идеальные кристаллы. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Реальные кристаллы. Типы	ЛК

	дефектов в реальных кристаллах. Кристаллы с неполной упорядоченностью. Доменные структуры. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней. Атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов. Цепочечные, каркасные и слоистые структуры. Строение твердых растворов. Упорядоченные твердые растворы. Аморфные вещества. Особенности строения полимерных фаз. Металлы и полупроводники. Зонная структура энергетического спектра кристаллов. Поверхность Ферми. Различные типы проводимости. Колебания в кристаллах. Фононы.	
	Разупорядоченные твёрдые тела. Жидкости. Мгновенная и колебательно усреднённая структура жидкости. Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Флуктуации и корреляционные функции. Структура простых жидкостей. Растворы неэлектролитов. Структура воды и водных растворов. Структура жидких электролитов. Мицеллообразование и строение мицелл. Мезофазы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы (нематики, смектики, холестерики и др.).	ЛК

6. ТЕМЫ РЕФЕРАТОВ

1. История развития физической химии.
2. Различные типы молекулярных волчков.
3. Вращательные уровни энергии.
4. Электронное строение атомов и молекул
5. Одноэлектронное приближение.
6. Атомные и молекулярные орбитали.
7. Основные положения классической теории химического строения.
8. Корреляционные орбитальные диаграммы.
9. Теорема Купманса
10. Структурная формула и граф молекулы.

7. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Технология процесса обучения аспирантов включает в себя следующие образовательные мероприятия:

- аудиторные занятия (лекции);
- самостоятельная работа аспирантов (в т.ч. с использованием системы дистанционного обучения);
- контрольные мероприятия в процессе обучения и по его окончанию: зачет.

В процессе изучения дисциплины, как лектором, так и обучающимися используется метод проблемного изложения материала, самостоятельное чтение аспирантами учебной, учебно-методической и справочной литературы, анализ информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по актуальным проблемам строения вещества.

Аудиторные занятия проводятся с использованием информационно-телекоммуникационных технологий: учебный материал представлен также в виде мультимедийных презентаций. Презентации позволяют четко структурировать материал занятия.

Самостоятельная работа аспирантов организована в соответствии с технологией проблемного обучения и предполагает следующие формы активности:

- поиск научной информации в открытых источниках с целью ее анализа и выявления ключевых особенностей исследуемых явлений;
- самостоятельная проработка учебно-проблемных задач, выполняемая с привлечением основной и дополнительной литературы, постановка которых отвечает целям освоения модуля;
- решение проблемных задач стимулируют познавательную деятельность и научно-исследовательскую активность аспирантов.

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

1. Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляемая на протяжении семестра. Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений.

2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация включает написание реферата. Завершает изучение дисциплины «Физическая химия I. Строение вещества и химическая связь» зачет с оценкой во 2 семестре.

Порядок проведения кандидатских экзаменов включает в кандидатский экзамен по научной специальности дополнительные разделы, обусловленные спецификой научной специальности. Билеты кандидатского экзамена по специальной дисциплине в соответствии с темой диссертации на соискание ученой степени кандидата наук должны охватывать разделы специальной дисциплины отрасли науки и научной специальности и дисциплины научной специальности по выбору аспиранта.

3. Фонд оценочных средств для проведения текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

Критерии оценивания для зачета с оценкой.

Оценка выставляется по итогам написания реферата.

Оценка «отлично» - наличие глубоких исчерпывающих знаний (в объеме утвержденной программы дисциплины в соответствии с поставленными программой курса целями и задачами обучения); грамотное и логически стройное изложение материала, усвоение основной и знакомство с дополнительной литературой.

Оценка «хорошо» - наличие твердых и достаточно полных знаний (в объеме утвержденной программы дисциплины в соответствии с целями обучения), правильные действия по применению знаний, умений, владений на практике, четкое изложение материала, допускаются отдельные логические и стилистические погрешности, сдающий усвоил основную литературу, рекомендованную в программе дисциплины;

Оценка «удовлетворительно» - наличие недостаточно полных знаний (в объеме утвержденной программы), изложение материала с отдельными ошибками, правильные в целом действия по применению знаний на практике.

Оценка «неудовлетворительно» - тема реферата не раскрыта, наличие грубых ошибок, непонимание сущности излагаемого вопроса, неумение применять знания на практике.

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для проведения обучения имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

- помещения для проведения занятий, оборудованные комплектом мебели;
- комплект проекционного мультимедийного оборудования;
- компьютеры с доступом к сети Интернет;

- библиотека с информационными ресурсами на бумажных и электронных носителях;
- офисная оргтехника;
- трубчатая печь с двумя зонами нагрева «SK2D-2-12TPA2» с постом откачным высоковакуумным Edwards «T-Station 75D»;
- комплект рентгеноэлектронного спектрометра ФТИ УрО РАН «ЭМС-3» для изучения электронной структуры и химического строения;
- дифрактометр рентгеновский Rigaku Miniflex 600 для исследования строения поликристаллических и аморфных материалов;
- электронный спектрометр SPECS для изучения электронной структуры, химического состава и химических связей;
- спектрометрический комплекс на базе «МДР-41» для регистрации спектров пропускания, зеркального и диффузного рассеяния, возбуждения и люминесценции;
- рентгеноэлектронный спектрометр ЭЗАН «ЭС-2401» для проведения качественного и количественного анализа вещества и тонких пленок, исследование электронной структуры и химической связи, послойный анализ распределения элементов;
- Оже - электронный спектрометр JEOL «JAMP-10S» для качественного и количественного анализа состава поверхностных слоев и межфазных границ.

10. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

1. Стромберг А.Г., Семченко Д. П. Физическая химия М.: Высш. шк., 2006. Учебник, Мин. образования РФ.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. <http://www.edu.ru/> - Российское образование. Федеральный портал.
2. <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/org.htm/> - Химический факультет МГУ: лекции, практические занятия, методические указания.
3. <http://www.scopus.com> - База цитирований.
4. <http://www.webofscience.com> - База цитирований.