

Наименование дисциплины	СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА
Интерактивные формы обучения	Интерактивные лекции, тренинги, мастер-классы, круглые столы, метод проектов, дискуссии, мини-конференции.
Цели освоения дисциплины	
<ul style="list-style-type: none"> - ознакомление студентов с современным учением о строении вещества; - формирование основ для понимания результатов квантово-химических расчетов и способов определения реакционной способности веществ с помощью квантово-химических расчетов. <p>Задачи дисциплины:</p> <ul style="list-style-type: none"> - рассмотрение моделей геометрического и электронного строения молекул, существующих в современной теоретической химии, - получение практических навыков по определению структуры и свойств молекул теоретическими и расчетными методами; - исследования рядов молекул и сопоставление свойств в рядах, - получение навыков постановки компьютерных экспериментов для исследования реакционной способности веществ с использованием теории граничных орбиталей, теории изолированной молекулы, теории локализации и др. 	
Место дисциплины в структуре ООП	
Дисциплина «Строение вещества» относится к базовой части дисциплин блока I ООП. Она базируется на знании курсов физики, химических дисциплин, информатики, а также дисциплине «Квантовая химия».	
Основное содержание	
Введение.	
Содержание понятий «строение вещества» и «структура вещества». Различные аспекты термина «строение молекул»: топологический, геометрический, электронный и др. Упорядоченные и неупорядоченные структуры конденсированных фаз. Общий обзор методов экспериментального и теоретического изучения строения молекул и строения вещества.	
Модуль 1.	
Геометрическое строение молекул. Параметры, определяющие геометрическую конфигурацию. Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки (ОЭПВО). Стереохимия соединений непереходных элементов.	
Метод молекулярной механики. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Определение геометрических параметров молекул с помощью программы NuserChem.	
Симметрия молекулярных систем. Операции и элементы симметрии ядерной конфигурации молекул. Точечные группы симметрии. Таблицы характеров. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение (дипольный момент, моменты инерции, формы нормальных колебаний и т.п.)	
Строение координационных соединений. Теория кристаллического поля. Качественные аспекты теории. Комплексы слабых и сильных полей. Спектроскопический ряд лигандов. Объяснение изменений термодимических, магнитных и других свойств в рядах соединений переходных элементов с позиций теории кристаллического поля.	
Молекулы органических соединений. Насыщенные углеводороды. Теория гибридизации. sp ³ -гибридизация АО углерода. Локализованные МО. Образование σ-связей. Свойства молекул. Молекулы с локализованными π-связями. Молекулы этилена и ацетилена. Диаграмма МО. Свойства молекулы.	
Свойства π-сопряженных систем. π-электронное приближение. Метод МО в приближении Хюккеля. Молекула бутадиена. Вековой определитель. Энергия π-МО. Волновые функции. Энергия делокализованных π-электронов. Энергия делокализации. Сравнение окислительных и восстановительных свойств в ряду молекул C ₂ H ₄ -C ₁₀ H ₁₂ с сопряженными π-связями.	
Ароматические соединения. Правило Хюккеля. Бензол, нафталин, антрацен. Молекулы	

циклоенов $C_4H_4-C_8H_8$. Вековые определители. Энергия π -электронов. Энергия изгиба σ -связей. Устойчивость ионов $C_5H_5^-$ и $C_7H_7^+$.

Модуль 2.

Качественная теория реакционной способности органических соединений. Теория изолированной молекулы. Индексы реакционной способности: порядки π -связей, индексы свободной валентности и заряды на атомах, самополяризуемость, анализ ВЗМО и НСМО, ПИ, СЭ и энергия возбуждения.

Метод граничных орбиталей. Симметрия МО, вид граничных МО и определение направления химического взаимодействия. Правила Вудворда-Гоффмана. Граничные орбитали для реакции Дильса-Альдера. Граничные орбитали для димеризации этилена. Влияние заместителей. Уравнение Гамета. Изменение энергий граничных МО при введении заместителей.

Предсказание скоростей химических реакций. Энергия локализации и активированный комплекс в реакции нуклеофильного и электрофильного замещения в бензоле и бутadiене. Типы локализации. Энергия катионной, анионной и радикальной локализации в различных молекулах с делокализованным π -электронным облаком. Связь энергии локализации и скорости химической реакции.

Биологическая активность органических соединений. Молекулярные дескрипторы.

Модуль 3.

Строение и свойства отдельных классов макромолекул

Молекулы органических и элементоорганических соединений. Полиядерные комплексные соединения. Хелаты. Полиэдраны. Фуллерены. Элементоорганические соединения. Металлоцены. Соединения включения (клатраты). Интеркаляты. Ротаксаны. Катенаны. Полимеры и биополимеры. Белки.

Модуль 4.

Межмолекулярные взаимодействия. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Ван-дер-ваальсовы силы. Стерические силы. Донорно-акцепторные комплексы и дативная связь. Водородная связь. Влияние межмолекулярных взаимодействий на свойства веществ.

Формируемые компетенции

Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);

Владение навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2);

Способность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3);

Владение системой фундаментальных химических понятий (ПК-3);

Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов (ПК-4).

Образовательные результаты

Знания: -основ современной теории строения твердых, жидких и газообразных веществ.

-основных теоретических и экспериментальных методов исследования строения вещества.

Умения - определять макросвойства веществ на основании их строения;

- применять знания о строении вещества при решении разнообразных задач химии и химической технологии, в том числе для определения реакционной способности веществ на основании их строения.

Владение: -практическими навыками по определению структуры и свойств молекул теоретическими и расчетными методами.

Взаимосвязь дисциплины с профессиональной деятельностью выпускника

Образовательные результаты, формирующие представления об особенностях реакционной способности веществ на основании анализа молекулярных свойств, проведения и анализа результатов квантово-химических расчетов, обеспечивают решение выпускником задач будущей профессиональной деятельности (научно-исследовательской, производственно-технологической, организационно-управленческой, педагогической).

АННОТАЦИИ ДИСЦИПЛИН ООП ПОДГОТОВКИ БАКАЛАВРОВ ПО НАПРАВЛЕНИЮ
04.03.01 ХИМИЯ,
ПРОФИЛЬ ПОДГОТОВКИ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ»
ФОРМА ОБУЧЕНИЯ – ОЧНАЯ
СРОК ОСВОЕНИЯ ООП – 4 ГОДА

Ответственная кафедра

Кафедра физики

Начальник УМУ _____



Н.Е. Гордина