

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ

Директор по образовательной
деятельности

С.Т. Князев

2020 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1143941	Современные теоретические основы химии материалов

Екатеринбург, 2020

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Химия и физика новых функциональных материалов	Код ОП 1. 04.04.02/33.01
Направление подготовки 1. Химия, физика и механика материалов	Код направления и уровня подготовки 1. 04.04.02

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Зуев Андрей Юрьевич	д.х.н., доцент	профессор	Физической и неорганической химии

Согласовано:

Управление образовательных программ



Р.Х. Токарева

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ **Современные теоретические основы химии материалов**

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль состоит из пяти дисциплин: «Избранные главы математики», «Квантовая химия», «Химия металлорганических и гибридных материалов», «Избранные главы физической химии твердого тела», «Элементы теоретической неорганической химии». Целью модуля является формирование у студентов представления о математических моделях и методах решения задач гидродинамики и теории тепло-массопереноса; знаний о теоретических основах строения вещества, принципах описания химической связи. Модуль знакомит с фундаментальной теорией химии и дает необходимую теоретическую базу для понимания и освоения квантовохимических расчетов и методов исследования химических систем, с теоретическими представлениями об органических, неорганических и металлоорганических материалах.

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Избранные главы математики	2
2	Квантовая химия	3
3	Химия металлорганических и гибридных материалов	3
4	Избранные главы физической химии твердого тела	3
5	Элементы теоретической неорганической химии	3
ИТОГО по модулю:		14

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	
Постреквизиты и корреквизиты модуля	

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3

<p>Избранные главы математики</p> <p>Квантовая химия</p> <p>Химия металлорганических и гибридных материалов</p> <p>Избранные главы физической химии твердого тела</p> <p>Элементы теоретической неорганической химии</p>	<p>ОПК-1 - Способен выявлять, формулировать и решать фундаментальные и прикладные задачи в области своей профессиональной деятельности и в междисциплинарных направлениях с использованием фундаментальных знаний и практических навыков</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях</p> <p>У-1 - Выявлять и определять цели и пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности, опираясь на фундаментальные законы и принципы, с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>П-1 - Предлагать пути решения фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях, опираясь на фундаментальные законы и принципы с использованием соответствующих целям подходов и методов</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
	<p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов</p> <p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и</p>

	<p>обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p>
--	--------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в форме:

Очная

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Избранные главы математики

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Зубарев Андрей Юрьевич	д.ф.-м.н., профессор	профессор	Теоретической и математической физики

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ

Авторы:

- Зубарев Андрей Юрьевич, профессор, Теоретической и математической физики

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1.	Основы гидродинамики	<p>Приближение механики сплошных сред. Предмет гидродинамики. Гидродинамика идеальной жидкости. Уравнения неразрывности, Эйлера и уравнение состояния. Гидростатика. Теоремы Бернулли и Кельвина. Примеры решения задачи с использованием теорем Бернулли и Кельвина. Потенциальное течение идеальной жидкости. Парадокс Даламбера-Эйлера. Присоединенная масса. Гравитационные волны в идеальной жидкости.</p> <p>Гидродинамика вязкой жидкости. Уравнения Навье-Стокса и граничные условия к нему. Примеры решения задач о вязком течении жидкости- плоские течения Куэтта и Пуазейля; течение жидкости по наклонной плоскости; сдвиговые волны в жидкости. Течения Куэтта и Пуазейля в цилиндрических каналах.</p> <p>Критерий Рейнольдса. Течения при малых числах Рейнольдса. Сила Стокса. Эффективная вязкость суспензий, формула Эйнштейна.</p> <p>Течение при больших числах Рейнольдса. Пограничный слой. Турбулентность. Логарифмический слой; турбулентный пограничный слой. Турбулентное течение в трубах.</p>
2.	Теория тепломассопереноса	<p>Уравнения теории тепломассопереноса. Различные виды потоков вещества и тепла (диффузионный, конвективный, седиментационный). Граничные условия I-IV родов.</p> <p>Методы решения задач переноса на отрезках: метод Фурье разделения переменных; метод разложения по собственным функциям. Решения задач на бесконечных и полубесконечных прямых - интегральные преобразования Фурье и Лапласа.</p> <p>Волновые решения нелинейных уравнений – задача Зельдовича о распространении фронта пламени; КПП задача.</p>

1.3. Программа дисциплины реализуется:
на государственном языке Российской Федерации.

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронные ресурсы (издания)

1. Петров, А. Г. Аналитическая гидродинамика : учебное пособие / А.Г. Петров .— Москва : Физматлит, 2010 .— 520 с. — <http://biblioclub.ru/> .— ISBN 978-5-9221-1008-2 .— <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=75706>>.
2. Александров, Д. В. Введение в гидродинамику : учебное пособие / Д.В. Александров, А.Ю. Зубарев, Л.Ю. Исакова .— Екатеринбург : Издательство Уральского университета, 2012 .— 112 с. — <http://biblioclub.ru/> .— ISBN 978-5-7996-0785-2 .— <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=239521>>.

Печатные издания

1. Бреховских, Леонид Максимович. Введение в механику сплошных сред в приложении к теории волн / Л.М. Бреховских, В.В. Гончаров; Акад. наук СССР. Отд-ние океанологии, физики атмосферы и географии .— М. : Наука, 1982 .— 335 с. 4 экз.
2. Ландау, Лев Давидович. Теоретическая физика : В 10 т. Т. 6. Гидродинамика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц .— 4-е изд., стер. — М. : Наука, 1988 .— 736 с. 14 экз.

Профессиональные базы данных, информационно-справочные

1. Зубарев, Андрей Юрьевич. Континуальные модели процессов переноса в биофизике : учеб. пособие для вузов / А. Ю. Зубарев, Е. А. Елфимова, Л. Ю. Исакова .— Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2009 .— 106, [1] с. : ил. — Библиогр.: с. 105 (6 назв.) .— ISBN 978-5-7996-0464-6 .— <URL:<http://hdl.handle.net/10995/30194>>.

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Не используются

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством	Не предусмотрено

		студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Избранные главы физической химии твердого
тела

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Зуев Андрей Юрьевич	д.х.н., доцент	профессор	Физической и неорганической химии

2. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ

Авторы:

- Зуев Андрей Юрьевич, профессор, Физической и неорганической химии

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1.1	Строение твердых веществ, Кристаллическое состояние вещества	Упорядочение и разупорядочение. Связь симметрии и внутреннего строения. Правила Полинга. Однородность и анизотропия.
1.2	Строение твердых веществ, Способы организации структур твердых веществ	Структуры с гексагональной и кубической плотнейшими упаковками. Тетрагональная упаковка. Дефекты упаковок, политипизм. Полиэдрическое описание кристаллических структур. Изоморфизм. Некоторые наиболее важные структурные типы. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Изовалентное и гетеровалентное замещение. Нестехиометричные соединения.
2.1	Химическая связь и электронное строение твердых веществ, Типы химической связи в твердом теле	Ван-дер-ваальсово взаимодействие в молекулярных кристаллах, клатраты. Ионная модель строения кристаллов, константа Маделунга, энергия ионной решетки. Цикл Борна—Габера и термодинамические расчеты. Основы теорий кристаллического поля и поля лигандов применительно к твердым телам. Влияние d -электронов. Энергия стабилизации кристаллическим полем и катионное распределение. Эффект Яна—Теллера. Сравнение тетраэдрического и октаэдрического окружений. Эффект неподеленных электронных пар.
2.2	Химическая связь и электронное строение твердых веществ, Зонная структура кристаллов	Образование зон в результате перекрывания орбиталей. Уровень Ферми. Химический потенциал. Заселенность зон, ее влияние на электрофизические свойства кристаллов. Валентная зона, запрещенная зона, зона проводимости. Металлы и диэлектрики. Собственные и примесные полупроводники. Электронная и дырочная проводимость. Общие представления о методах расчета зонной структуры кристаллов. Границы применимости зонной модели.

3.1	Термодинамика и фазовые равновесия конденсированных сред, Основные понятия	Начала термодинамики. Термодинамический анализ физических и химических равновесий. Основные типы конденсированных фазовых диаграмм двухкомпонентных систем: с простой эвтектикой, с образованием конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся промежуточных соединений, с расщеплением в жидкой фазе, с неограниченными и ограниченными твердыми растворами, с полиморфизмом компонентов и соединений. Конденсированные диаграммы трехкомпонентных систем. Фазовые равновесия в субсолидусной области.
3.2	Термодинамика и фазовые равновесия конденсированных сред, Фазовые переходы	Переходы I и II рода. Структурные изменения при фазовых переходах. Интерпретации П. Эренфеста, Л.Д. Ландау, Ж.М. Бюргерса.
3.3	Термодинамика и фазовые равновесия конденсированных сред, Проблемы уравнения состояния твердого тела	Симметрия и анизотропия. Скалярные, векторные и тензорные свойства. Тензоры разных рангов. Коэффициенты термического расширения (α), термического роста давления (β) и изотермического сжатия (γ). Формула Грюнайзена. Модель Дебая
4.1	Химические реакции твердых веществ, Термодинамические оценки возможности прохождения химических реакций с участием твердых тел	Общие закономерности скорости гетерогенных химических процессов с участием твердых тел. Элементарные кинетические стадии процессов. Роль массопереноса. Процессы, лимитируемые диффузионными и кинетическими стадиями. Роль зародышеобразования в процессах, сопровождающихся образованием твердых продуктов. Термодинамика формирования новой фазы. Критическое пересыщение, критический размер зародыша. Кинетика образования и роста зародышей. Кинетическое описание твердофазных процессов. Общий вид кинетических уравнений. Реакционная зона, ее структура, пространственное перемещение.
4.2	Химические реакции твердых веществ, Классификация химических гетерогенных процессов с участием твердых фаз	Термическое разложение твердых фаз с образованием продуктов в различных фазовых состояниях. Распад твердых растворов по спинодальному механизму и механизму роста зародышей. Реакции твердая фаза — твердая фаза, твердая фаза — газ, твердая фаза — жидкость. Примеры. Кинетические особенности процессов в каждом случае. Модели процессов. Диффузионные: Яндера, Гинтлинга-Броунштейна, Вагнера, Валанси-Картера, Дюнвальда-Вагнера-Серина-Элликсона, Коматсу. Анти-модели. Кинетические модели процессов, лимитируемых химической реакцией. Процессы, лимитируемые стадией зародышеобразования.
5.1	Классификация погрешностей,	Погрешности абсолютные и относительные, положительные и отрицательные, постоянные и

	Принципы обработки результатов эксперимента	пропорциональные случайные и систематические, погрешности единичного измерения, среднего значения, генерализованная погрешность, погрешности прямых и косвенных измерений. Источники происхождения погрешностей.. Релятивизация и рандомизация погрешностей. Погрешности интерпретации
5.2	Классификация погрешностей, Основные положения математической статистики и случайные погрешности	Случайная величина и ее характеристики. Стандартное отклонение и рациональные способы его расчета. Выявление истинной асимметрии в распределении частот появления результатов. Асимметрия и эксцесс. Нормальное распределение Гаусса и его свойства. Интегральная нормированная функция Гаусса. Удвоенная нормированная функция Лапласа и вероятность появления значения. Доверительный интервал. Другие распределения, связанные с нормальным: X-распределение (критерий Пирсона), F-распределение (критерий Фишера), G-распределение (критерий Кохрана). Сравнение дисперсий. Сравнение средних результатов. Определение и исключение грубых погрешностей. Винсоризация.
5.3	Классификация погрешностей, Регрессионный и корреляционный анализ	Статистика прямых линий. Метод наименьших квадратов. Расчет коэффициентов регрессии и погрешностей их значений. Коэффициент корреляции и его расчет. Распространение погрешностей на вычисления. Суммарная дисперсия. Значащие цифры и правила округления.

2.3. Программа дисциплины реализуется:
на государственном языке Российской Федерации.

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронные ресурсы (издания)

Не используются

Печатные издания

1. Вест, Антони Р. Химия твердого тела. Теория и приложения : В 2 ч. : Пер. с англ. Ч. 1 / А. Р. Вест. — М. : Мир, 1988. — 556 с 10 экз
2. Вест, Антони Р. Химия твердого тела. Теория и приложения : В 2 ч. : Пер. с англ. Ч. 2 / А. Р. Вест; Под ред. Ю. Д. Третьякова. — М. : Мир, 1988. — 334 с. 10 экз.
3. Чеботин, Василий Николаевич. Физическая химия твердого тела / В. Н. Чеботин ; Ред. В. И. Козлова ; Худож. А. Я. Михайлов. — М. : Химия, 1982. — 320 с. 23 экз
4. Иванов-Шиц А.К., Мурин И.В. Ионика твердого тела. Санкт-Петербургский Университет.2000.
5. Кнотько, Александр Валерьевич. Химия твердого тела : учеб. пособие для студентов, обучающихся по специальности 020101 (011000) "Химия" / А. В. Кнотько, И. А. Пресняков, Ю. Д. Третьяков. — Москва : Академия, 2006. — 304 с 33 экз

6. Третьяков, Юрий Дмитриевич. Введение в химию твердофазных материалов : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по направлению подгот. "Химия, физика и механика материала" / Ю. Д. Третьяков, В. И. Путляев ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова .— Москва : Издательство Московского университета : Наука, 2006 .— 400 с. : ил. ; 22 см .— (Классический университетский учебник) .— Предм. указ.: с. 392-396. — Библиогр.: с. 390-391. — Рекомендовано в качестве учебного пособия .— ISBN 5-211-06045-8 .— ISBN 5-02-034137-1. 4 Экз

7. Ярославцев, Андрей Борисович. Химия твердого тела : [монография] / А. Б. Ярославцев .— Москва : Научный Мир, 2009 .— 328 с. 6 экз

Профессиональные базы данных, информационно-справочные

1. А.Н. Петров. Учебно-методический комплекс дисциплины "Твердые материалы. Химия дефектов, структура, свойства" [Электронный ресурс] / Урал. гос. ун-т, Екатеринбург: 2007. URL: <http://elar.urfu.ru/handle/10995/1314>

2. Зуев, А.Ю. Учебно-методический комплекс дисциплины "Дефекты и свойства перспективных оксидных материалов" [Электронный ресурс]/ Урал. гос. ун-т Екатеринбург: 2008. URL: <http://elar.urfu.ru/handle/10995/1543>

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

American Chemical Society
eLibrary ООО Научная электронная библиотека
American Institute of Physics
Платформа Nature
Springer Nature
ScienceDirect Freedom Collection Elsevier
Scopus
Elsevier
Springer Materials
Springer Nature
SpringerLink
Springer Nature
Web of Science Core Collection
Web of Science

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Квантовая химия

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Сафронов Александр Петрович	д.ф.-м.н., профессор	профессор	Фундаментальной и прикладной химии

3. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ

Авторы:

- Сафронов Александр Петрович, профессор, Фундаментальной и прикладной химии

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1.	Теория симметрии молекул	Геометрия молекул, химические связи и валентные углы. Конфигурация молекулы, ее предсказание на основании теории гибридизации и отталкивания электронных пар. Конформация молекулы. Внутреннее вращение, потенциальный барьер перехода между конформациями. Симметрия молекул. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представление операций симметрии. Неприводимые представления. Характеры представлений, таблицы характеров. Полное представление симметрии, его характер. Разбиение полного представления на неприводимые. Учет симметрии молекул при рассмотрении их физических свойств. Колебания сложных молекул. Нормальные колебания, их симметрия. Анализ нормальных колебаний с помощью таблицы характеров. Методы наблюдения колебаний молекул – инфракрасная спектроскопия и комбинационное рассеяние света. Правила отбора нормальных колебаний в инфракрасном спектре и спектре комбинационного рассеяния. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, разрешенные по симметрии линейные комбинации АО. Использование теории симметрии для определения вида МО. Полное представление симметрии линейных комбинаций АО. Проекционный оператор, определение вкладов АО в молекулярные. Правила отбора в электронных спектрах поглощения. Полная волновая функция электронной конфигурации молекулы, ее симметрия. Интеграл момента перехода и его компоненты.
2.	Приближенные методы квантовой химии	Электронное строение сложных молекул. Варианты расчетной реализации метода Рутаана. Базис решения. Слейтеровские и гауссовы орбитали, их особенности. Оптимизация геометрии стационарного состояния молекул в рамках квантовых расчетов. Электронные конфигурации молекул, конфигурационное взаимодействие. Приближенные методы расчета молекулярных орбиталей сложных молекул. Методы нулевого дифференциального перекрытия, полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием, их связь с методом Рутаана.. Семейство методов CNDO, их вычислительные

		<p>особенности и возможности. Расчетные полуэмпирические методы М.Дьюара: MINDO/3, MNDO, PM3. Сравнительный анализ различных вариантов расчетных методов. Расчет энергии основных и возбужденных электронных состояний, энергии перехода между ними. Интерпретация и предсказание молекулярных электронных спектров. Вычисление молекулярных постоянных, дипольных и квадрупольных моментов, оценка магнитных свойств.</p> <p>Метод молекулярной механики, его основные особенности. Оптимизация геометрической структуры молекул в методе молекулярной механики. Использование компьютеров для расчета электронного строения молекул. Основные пакеты прикладных программ для персональных компьютеров, их особенности и возможности. Прикладной пакет полуэмпирических расчетов MOPAC. Внутренние координаты молекулярной системы. Структура Z-матрицы геометрической структуры молекулы.</p>
3.	Теоретическое описание взаимодействия молекул	<p>Квантово-химическое описание химических реакций. Поверхность потенциальной энергии. Качественные характеристики поверхностей потенциальной энергии и их сечений. Использование классических траекторий на поверхности потенциальной энергии. Переходное состояние. Реакции в пределах одной поверхности. Симметрия реагентов и продуктов реакции. Корреляционные правила. Влияние симметрии геометрической конфигурации на свойства и реакционную способность органических соединений. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях. Правила Вудворда-Хоффмана. Границы применения принципов сохранения орбитальной симметрии.</p> <p>Общность физической природы внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий. Приближенные методы описания межмолекулярных взаимодействий. Применение метода возмущений для описания межмолекулярных взаимодействий. Дисперсионные, индукционные и ориентационные взаимодействия. Силы Ван-дер-Ваальса. Потенциальные функции парных межмолекулярных взаимодействий. Функции Леннарда-Джонса и Борна-Майера. Специфические межмолекулярные взаимодействия. Понятие электроно-донорноакцепторного взаимодействия. Типы доноров и акцепторов. Водородная связь, ее специфические особенности. Экспериментальное наблюдение электроно-донорноакцепторных взаимодействий. Донорные и акцепторные числа. Квантово-механические и статистические подходы к описанию межмолекулярных взаимодействий.</p>

3.3. Программа дисциплины реализуется:
на государственном языке Российской Федерации.

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронные ресурсы (издания)

Крашенинин, В. И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012 .— 56 с. — <http://biblioclub.ru/> .— ISBN 978-5-8353-1298-6 .— <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>>.

Печатные издания

1. Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика молекул и квантовая химия : Учеб. пособие: для хим. спец. вузов / Степанов Николай Федорович, Пупышев Владимир Иванович .— М. : Изд-во Моск. ун-та, 1991 .— 383 с. 36 экз.
2. Фларри, Р. Л. Квантовая химия. Введение / Р. Л. Фларри ; пер. с англ. Э. Д. Германа, Е. Л. Розенберга ; под ред. А. М. Бродского .— Москва : Мир, 1985 .— 472 с. 13 экз

Профессиональные базы данных, информационно-справочные

American Chemical Society
eLibrary ООО Научная электронная библиотека
American Institute of Physics
Платформа Nature
Springer Nature
ScienceDirect Freedom Collection Elsevier
Scopus
Elsevier
Springer Materials
Springer Nature
SpringerLink
Springer Nature
Web of Science Core Collection
Web of Science

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

American Chemical Society
eLibrary ООО Научная электронная библиотека
American Institute of Physics
Платформа Nature
Springer Nature
ScienceDirect Freedom Collection Elsevier
Scopus
Elsevier
Springer Materials
Springer Nature

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Химия металлорганических и гибридных материалов

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Русинова Елена Витальевна	д.х.н., доцент	профессор	Органической химии и высокомолекуляр ных соединений

4. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ

Авторы:

- **Русинова Елена Витальевна, профессор, Органической химии и высокомолекулярных соединений**

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Металлорганические соединения	История металлорганической химии. Открытие ферроцена. Кратные связи металл-углерод. Роль металлорганических соединений в катализе. Электронное строение металлорганических соединений. Теория кристаллического поля. Высокоспиновые и низкоспиновые комплексы. Теория поля лигандов. Типы лигандов. Реакции замещения, отщепления и присоединения. Внедрение и элиминирование.
2	Полимерные гибриды	Значение, применение композиционных полимерных материалов. Сополимеры как полимерные гибриды. Получение и строение полимерных гибридов. Химическое и физическое смешение. Метод прививки растворителя. Способы получения блоксополимеров и взаимопроникающих сеток. Свойства полимерных гибридов. Отличия свойств блоксополимеров от статистических сополимеров и смесей. Структура и особенности свойств термоэластопластов. Блоксополимеры как компатибилизаторы. Типы взаимопроникающих сеток. Структура взаимопроникающих сеток. Влияние различных факторов на морфологию сетки и механические свойства.

4.3. Программа дисциплины реализуется:

на государственном языке Российской Федерации.

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронные ресурсы (издания)

Не используются

Печатные издания

1. Полимерные смеси : [в 2 т.] / под ред. Д. Р. Пола и К. Б. Бакнелла ; пер. с англ. под ред. В. Н. Кулезнева .— СПб. : НОТ, 2009 .— ISBN 978-5-91703-006-7. Т. 1: Систематика .— 2009 .— 616 с. 6 экз
2. Полимерные смеси : [в 2 т.] / под ред. Д. Р. Пола и К. Б. Бакнелла ; пер. с англ. под ред. В. Н. Кулезнева .— СПб. : НОТ, 2009 .— ISBN 978-5-91703-006-7. Т. 2: Функциональные свойства .— 2009 .— 605 с. 6 экз.
3. Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технологии : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности "Технол. перераб. пласт. масс и эластомеров" / [М. Л. Кербер, В. М. Виноградов, Г. С. Головкин и др.] ; под ред. А. А. Берлина .— Санкт-Петербург : Профессия, 2008 .— 560 с. 12 экз.
4. Тагер, Анна Александровна. Физико-химия полимеров : [учеб. пособие для хим. фак. ун-тов] / А. А. Тагер ; под ред. А. А. Аскадского .— изд. 4-е, перераб. и доп. — М. : Научный мир, 2007 .— 573 с 4. Биометаллоорганическая химия / ред. Ж. Жауэн; пер с англ. – 2-е изд. М.: БИНОМ. Лаборатория знания □. – 2015. – 505 с. 79 экз.

Профессиональные базы данных, информационно-справочные

Не используются

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Не используются

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в	Не предусмотрено

		соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Элементы теоретической неорганической химии

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Кочетова Надежда Александровна	к.х.н., доцент	доцент	Физической и неорганической химии

5. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ

Авторы:

- Кочетова Надежда Александровна, доцент, Физической и неорганической химии

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Атом и его строение	Атомно-молекулярное учение. Закон эквивалентных отношений. Строение атома. Основные принципы и положения квантовой механики. Современная модель атома. Электронные конфигурации атомов. Свойства атомов. Строение и превращение атомного ядра. Периодический закон и Периодическая система элементов. Закономерности элементов и соединений. Химическая связь и строение молекул.
2	Комплексные соединения	Основные понятия. Координационная теория Вернера. Типы и номенклатура комплексов. Строение комплексных соединений. Природа химической связи в комплексах. Получение комплексов. Значение комплексных соединений.
3	Основы термодинамики и химической кинетики	Основные понятия термодинамики. Первое начало термодинамики. Второе начало термодинамики. Химический потенциал. Основные понятия химической кинетики. Факторы, влияющие на скорость реакции.
4	Химическое и фазовое равновесие в системах	Закон действующих масс. Факторы, влияющие на равновесие. Принцип Ле Шателье-Брауна. Равновесие в гетерогенных реакциях. Агрегатные состояния вещества. Фазовые переходы. Фазовая диаграмма. Правило фаз Гиббса.
5	Растворы	Типы растворов. Теории образования растворов. Идеальные растворы. Реальные растворы. Растворение газов в жидкости. Растворение твердых тел в жидкости. Диффузия. Осмос. Эбулиоскопия. Криоскопия. Растворы электролитов. Теория электролитической диссоциации. Классификация электролитов. Сильные и слабые электролиты. Гидролиз солей. Буферные растворы.

5.3. Программа дисциплины реализуется:
на государственном языке Российской Федерации.

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронные ресурсы (издания)

Общая и неорганическая химия : учебный справочник / ; сост. А. Ф. Гусева ; сост. И. Н. Атманских ; сост. Л. И. Балдина ; сост. И. Е. Анимица ; сост. С. Э. Нохрин ; сост. Н. А. Кочетова ; под общ. ред. С. С. Нохрин ; Министерство образования и науки Российской Федерации ; Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина .— Екатеринбург : Издательство Уральского университета, 2012 .— 80 с. — <http://biblioclub.ru/> .— ISBN 978-5-7996-0737-1 .— <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=239713>>

Печатные издания

1. Барнард, А. К. Теоретические основы неорганической химии / А. К. Барнард ; пер. с англ. Я. Х. Гринберга и Г. С. Терешина ; под ред. И. В. Тананаева .— Москва : Мир, 1968 .— 361 с. 96 экз.
2. Неорганическая химия : учебник для вузов. Т. 1. Физико-химические основы неорганической химии / под ред. Ю. Д. Третьякова .— М. : Academia, 2004 .— 240 с. 36 экз.
3. Общая и неорганическая химия : учеб. для вузов, обучающихся по направлению и специальности "Химия" / Я. А. Угай .— 5-е изд., стер. — Москва : Высшая школа, 2007 .— 527 с. 57 экз

Профессиональные базы данных, информационно-справочные

Не используются

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Не используются

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено

2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная	Не предусмотрено