

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
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

| Код модуля | Модуль |
|------------|---|
| 1158191 | Современные теоретические основы химии материалов |

Екатеринбург

| 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 | доктор химических наук, профессор | Профессор | физической и неорганической химии |
| 2 | Кочетова Надежда Александровна | кандидат химических наук, доцент | Доцент | физической и неорганической химии |
| 3 | Лебедева Елена Леонидовна | кандидат химических наук, без ученого звания | Доцент | аналитической химии и химии окружающей среды |
| 4 | Русинова Елена Витальевна | доктор химических наук, доцент | Профессор | органической химии и высокомолекулярных соединений |
| 5 | Сафронов Александр Петрович | доктор физико-математических наук, профессор | Профессор | Департамент фундаментальной и прикладной химии |

Согласовано:

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

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

1.1. Аннотация содержания модуля

Модуль состоит из пяти дисциплин: «Математическая обработка результатов измерений», «Квантовая химия», «Химия металлоорганических 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 обработки результатов измерений; 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 физической химии твердого тела | 3 |
| 2 | Химия металлоорганических и гибридных материалов | 3 |
| 3 | Элементы теоретической неорганической химии | 3 |
| 4 | Квантовая химия | 3 |
| 5 | Математическая обработка результатов измерений | 2 |
| ИТОГО по модулю: | | 14 |

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

| | |
|------------------------------------|------------------|
| Пререквизиты модуля | Не предусмотрены |
| Постреквизиты и кореквизиты модуля | Не предусмотрены |

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 |
| Избранные главы физической химии твердого тела | 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>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>Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе</p> |
| | ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты | <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>Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p> |
| | <p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p> | <p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и 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> |
| Квантовая химия | <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>Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе</p> |
| | <p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные</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</p> |

| | | |
|--|---|---|
| | реальные или модельные эксперименты | современной методологии, методов, оборудования и техники Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление |
| | ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области | З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения |
| Математическая обработка результатов измерений | 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 | З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе |
| | ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты | З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели |
| | ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в | У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов |

| | | |
|--|--|---|
| | <p>профессиональной области</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> |
| <p>Химия металлорганических и гибридных материалов</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-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе</p> |
| | <p>ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты</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> |

| | | |
|---|---|--|
| | | Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели |
| | ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области | У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения |
| Элементы теоретической неорганической химии | 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 | З-1 - Демонстрировать понимание фундаментальных принципов, методов и подходов к решению фундаментальных и прикладных задач в профильной области деятельности и междисциплинарных направлениях 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 Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление Д-2 - Проявлять лидерские качества и умения работать в научном коллективе |
| | ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные реальные или модельные эксперименты | З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление |

| | | |
|--|--|---|
| | | Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели |
| | ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области | З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения |

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Избранные главы физической химии
твёрдого тела

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

| № п/п | Фамилия Имя Отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|-----------------------------|--|------------------|--------------------------------|
| 1 | Зуев Андрей Юрьевич | доктор химических наук, профессор | Профессор | Кафедра физической химии |

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Зуев Андрей Юрьевич, Профессор, физической и неорганической химии

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

| Код раздела, темы | Раздел, тема дисциплины* | Содержание |
|-------------------|--|---|
| 1 | Введение. Предмет и задачи дисциплины. Элементы кристаллохимии. | Предмет курса, его связь с наукой и практикой. Особенности кристаллического состояния вещества. Процессы упорядочения и разупорядочения в веществе. Химическая связь в кристаллах. Основные понятия и определения. Операции и элементы симметрии. Пространственная решетка. Трансляция, вектор трансляции и период трансляции. Точечные группы (классы) симметрии. Пространственные группы симметрии. Решётки Бравэ. Источники рентгеновского излучения. Уравнение Брэгга – Вульфа. Рентгеновский фазовый и структурный анализ. Метод Ритвельда. |
| 2 | Термодинамика кристаллов. Сумма по состояниям и её связь с термодинамическими функциями. Термодинамические свойства идеального кристалла. Структурные дефекты кристаллической решётки. Термодинамика кристалла с дефектами. Квазихимический метод описания реальной (дефектной) структуры кристалла. Полное термическое равновесие дефектов в кристалле. | Молекулярная и статистическая сумма по состояниям. Определение и связь с наиболее важными термодинамическими свойствами: внутренней энергией, теплоёмкостью, энтропией, функциями Гельмгольца и Гиббса. Идеальный кристалл, как система гармонических осцилляторов. Расчет статистической суммы по состояниям идеального кристалла. Внутренняя энергия, энтропия, функции Гельмгольца и Гиббса идеального кристалла. Теплоёмкость идеального кристалла. Модели Эйнштейна и Дебая. Определение и классификация типов структурных дефектов. Точечные дефекты, линейные дефекты, двумерные дефекты, трёхмерные дефекты. Сумма по состояниям дефектного кристалла. Термическое равновесие кристалла. Химический потенциал точечного дефекта. Номенклатура точечных дефектов по Крёгеру-Винку. Структурно чувствительные |

| | | |
|---|---|--|
| | Равновесие твёрдое тело – газ. | свойства кристаллов. Правила записи квазихимических уравнений. Закон действия масс в применении к квазихимическим реакциям. Донорные и акцепторные дефекты. Термодинамическое описание термического равновесия дефектов в произвольном кристалле. Метод Броуэра. Применение метода Броуэра к анализу равновесия кристалла с окружающей газовой фазой. Влияние примесей на равновесие дефектов в кристалле. |
| 3 | Методы исследования термодинамики процессов в твёрдом теле и дефектной структуры. Калориметрия. Метод ЭДС. Термогравиметрия. Кулонометрическое титрование. Исследование электропроводности. | Исследование твердофазных реакций. Теоретические основы метода ЭДС, конструкция измерительной ячейки. Определение термодинамической стабильности оксидов в атмосферах с различным содержанием кислорода. Термогравиметрия для изучения кислородной нестехиометрии оксидов в зависимости от температуры и парциального давления кислорода. Восстановление оксидов в токе водорода. Кулонометрия, как наиболее прецизионный метод изучения кислородной нестехиометрии в зависимости от парциального давления кислорода и температуры. Переход из относительной шкалы нестехиометрии в абсолютную. Определение парциально-молярных свойств кислорода в оксидах. Конструкция измерительной ячейки. |
| 4 | Использование зависимости различных свойств оксидов от парциального давления кислорода и температуры для анализа дефектной структуры. | Зависимости общей электропроводности и кислородной нестехиометрии от парциального давления кислорода при постоянной температуре в применении к анализу дефектной структуры. Основные приёмы и методы анализа дефектной структуры. |
| 5 | Практическое приложение физической химии твёрдого тела. | Физическая химия твёрдого тела в науке и технике: мембраны для парциального окисления газов, катализаторы, твердооксидные топливные элементы, датчики парциального давления газов. |

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Избранные главы физической химии твердого тела

Электронные ресурсы (издания)

1. Уваров, Н. Ф.; Химия твердого тела : учебное пособие.; Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск; 2019; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=575292> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Вест, Антони Р., А. Р.; Химия твердого тела. Теория и приложения : В 2 ч. : Пер. с англ. Ч. 1. ; Мир,

Москва; 1988 (10 экз.)

2. Вест, А., Антони Р., Кауль, А. Р., Куценко, И. Б., Третьяков, Ю. Д.; Ч. 1 : теория и приложения.; Мир, Москва; 1988 (7 экз.)

3. Жуковский, В. М., Конев, В. Н.; Введение в химию твердого тела : учеб. пособие.; Изд-во Урал. гос. ун-та, Свердловск; 1978 (40 экз.)

4. Жуковский, В. М., Конев, В. Н.; Вводный курс в электрохимию дефектных кристаллов : Учеб. пособие.; Изд-во Урал. гос. ун-та, Свердловск; 1979 (59 экз.)

5. Жуковский, В. М.; Термодинамика и кинетика реакций в твердых телах : Учеб. пособие. Ч. 1. ; Издательство Уральского университета, Свердловск; 1987 (58 экз.)

6. Петров, А. Н.; Твердые материалы. Химия дефектов. Структура и свойства твердых тел : [учеб. пособие для вузов].; Изд-во Урал. ун-та, Екатеринбург; 2008 (98 экз.)

7. Чеботин, В. Н., Козлова, В. И., Михайлов, А. Я.; Физическая химия твердого тела; Химия, Москва; 1982 (23 экз.)

8. Ковтуненко, П. В.; Физическая химия твердого тела: Кристаллы с дефектами : Учеб. для вузов по спец. "Хим. технология материалов и изделий электрон. техники".; Высш.шк., Москва; 1993 (14 экз.)

9. Третьяков, Ю. Д.; Твердофазные реакции; Химия, Москва; 1978 (7 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

American Chemical Society

eLibrary

ООО Научная электронная библиотека

Elsevier

ScienceDirect Freedom Collection

Scopus

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

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Избранные главы физической химии твердого тела

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 |
|-------|---|---|---|
| 1 | Лекции | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 2 | Практические занятия | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся | OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11 |
| 3 | Консультации | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11 |
| 4 | Текущий контроль и промежуточная аттестация | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11 |
| 5 | Самостоятельная работа студентов | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов | OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | | Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет | Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11 |
|--|--|--|--|

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Химия металлоорганических и гибридных
материалов

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

| № п/п | Фамилия Имя Отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|------------------------------|--|------------------|---|
| 1 | Русинова Елена Витальевна | доктор химических наук, доцент | Профессор | Кафедра органической химии и высокомолекуляр ных соединений |

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Русинова Елена Витальевна, Профессор, органической химии и высокомолекулярных соединений

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

| Код раздела, темы | Раздел, тема дисциплины* | Содержание |
|-------------------|---|---|
| 1 | Восстановление ионов металлов в полимерных матрицах как конденсационный метод синтеза нанокompозитов. | Основные представления о формировании наночастиц при химическом восстановлении. Химические методы восстановления. Методы электрохимического восстановления. |
| 2 | Физико-химические методы получения нанокompозитов. | Синтез нанокompозитов под действием микроволнового излучения. Фотохимическое восстановление. Радиационно-химическое восстановление. Сонохимическое восстановление. Физическое и химическое осаждение из газовой фазы. |
| 3 | Нанокompозиты, сформированные в ходе золь-гель процессов. | Общая характеристика золь-гель реакций. Сочетание реакций полимеризации и золь-гель синтеза нанокompозитов in situ. Формирование неорганического прекурсора в присутствии органических полимеров. Полимерный золь-гель синтез. Гибридные нанокompозиты на основе гетероэлементной оксид/оксидной керамики. Морфология и фрактальные модели гибридных нанокompозитов. |
| 4 | Физико-химия интеркалированных наносистем. | Состав, структура и интеркаляционные свойства слоистых материалов. Общая характеристика интеркалированных систем. Специфика полимеризации мономеров во внутрислоевом пространстве. Гибридные нанокompозиты, получаемые прямым интеркалированием макромолекул в слою “хозяина”. Супрамолекулярная сборка в нанослоистых материалах. Структура нанокompозитов внедрения |

| | | |
|---|---|--|
| | | халькогенид металла – полимер. Структура нанокompозитов внедрения халькогенид металла – полимер. |
| 5 | Элементоорганические гибридные нанокompозиты на основе фенолформальдегидной смолы и диоксида кремния. | Приготовление гибридных керамеров. Схема реакции. Экспериментальные методы исследования композитов. Термические, морфологические, механические характеристики гибридов. Исследования на горючесть и огнестойкость. |
| 6 | Магнитные полимерные нанокompозиты (МПН). | Классификация МПН. Методы синтеза МПН. Методы изучения характеристик МПН. Магнитные свойства. |

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Химия металлоганических и гибридных материалов

Электронные ресурсы (издания)

1. , Грахов, А. Е., Ю-Винг, М., Жонг-Женг, Ю.; Полимерные нанокompозиты : монография.; РИЦ Техносфера, Москва; 2011; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=115690> (Электронное издание)
2. ; Дисперсно-наполненные полимерные нанокompозиты : монография.; Казанский научно-исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань; 2012; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=258354> (Электронное издание)

Печатные издания

1. , Виноградов, В. М., Кербер, М. А., Головкин, Г. С., Берлин, А. А.; Полимерные композиционные материалы: структура, свойства, технологии : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности "Технол. перераб. пласт. масс и эластомеров".; Профессия, Санкт-Петербург; 2008 (13 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

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

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Химия металлоорганических и гибридных материалов

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 |
|-------|---|--|--|
| 1 | Лекции | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 2 | Практические занятия | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 3 | Консультации | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 4 | Текущий контроль и промежуточная аттестация | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 5 | Самостоятельная работа студентов | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов | Не требуется |

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 | кандидат химических наук, доцент | Доцент | Кафедра физической химии |

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Кочетова Надежда Александровна, Доцент, физической и неорганической химии

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

| Код раздела, темы | Раздел, тема дисциплины* | Содержание |
|-------------------|--|--|
| 1 | Современные представления о периодическом законе и Периодической системе элементов | <p>История открытия Периодического закона Д.И. Менделеевым. Понятие о Периодической системе как математическом описании периодического закона. Развитие теоретических представлений о Периодической системе (доквантовый и квантовый этапы). Квантово-механическая модель строения атома, периодичность в изменении электронных конфигураций. Принцип Паули как основа периодического закона. Представление о периодических таблицах как графическом отображении Периодической системы. Формы периодических таблиц: сверхдлинная, длинная (длиннопериодная), короткая (короткопериодная) – их преимущества и недостатки.</p> <p>Этапы развития научных представлений о структуре нижней границы Периодической системы Д.И. Менделеева. Химический этап. Развитие Периодической системы химических элементов в области её верхней границы.</p> <p>Периодичность изменения свойств элементов. Виды периодичности: главная, внутренняя, вторичная. Общие принципы проявления Периодического закона в химии переходных и непереходных элементов. Исторический аспект возникновения представлений о вторичной периодичности. Вторичная и внутренняя периодичность в рамках современных теоретических представлений.</p> |

| | | |
|---|--------------------------------------|---|
| 2 | Химическая связь и ее характеристики | <p>Типы связи в конденсированных средах. Ковалентная, ионная, металлическая, донорно-акцепторная, Ван-дер-Ваальсова связь. Современные теории их описания. Концепция гипервалентных связей. Основные положения метода гипервалентных связей. Понятие о трехцентровых двух- и четырехэлектронных молекулярных орбиталях. Влияние электроотрицательности лигандов на прочность гипервалентных связей. Валентные возможности и характерные степени окисления непереходных элементов в рамках метода гипервалентных связей, объяснение правила четности. Понятие об электроннодефицитных связях. Строение межгаллоидных молекул и ионов, молекул фторидов благородных газов и боргидридов, описание водородной связи в рамках метода гипервалентных связей.</p> <p>Соотношение энергий. Соотношение между энергиями атомизации, разрыва молекул на атомы и энергиями фазовых переходов (сублимация, испарение, плавление, модификационные переходы), его смысл.</p> <p>Методы расчета и оценки энергии связей. Степень ионности связей, ее оценка по Полингу, Филлипсу, Брауну-Шэннону.</p> <p>Энергетические характеристики атомов и ионов. Эффективные заряды атомов, представления Слейтера. Различие энергетических характеристик атомов и ионов в свободном и связанном состоянии. Понятие электроотрицательности, его физический смысл и эволюция. Орбитальная электроотрицательность. Электроотрицательность по Малликену. Термохимическая электроотрицательность по Полингу. Кристаллические электроотрицательности. Поляризуемость атомов и ионов. Теория поляризации.</p> |
| 3 | Кристаллическое строение вещества | <p>Размерные характеристики атомов, ионов, молекул. Радиус иона, причины неопределенности понятия и размерных характеристик. Системы радиусов ионов.</p> <p>Полиэдрическое описание строения и структуры простых и сложных соединений. Понятие о координационных полиэдрах. Правильные и полуправильные полиэдры, встречающиеся в структурной химии. Способы соединения полиэдров в пространстве. Полиэдры как плотнейшие упаковки ионов.</p> <p>Полиэдрическое описание структуры простых и сложных оксидов. Структурные типы хлорида натрия, рутила, флюорита и антифлюорита, оксида рения, корунда, вюртцита, кварца и куприта; структуры оксидов типа $\text{Э}_2\text{O}_3$ для d- и f-элементов. Структурные типы сложных оксидов: структуры перовскита, шпинели, граната и шеелита.</p> <p>Правила Полинга для ионных и ковалентных структур, их современное обоснование. Расчет силы связи (связевой валентности, валентного усилия связи, порядка и кратности связи). Расчет числа атомов металлов, связанных с одним электроотрицательным атомом. Уточнение структур, расчет длин связей, оценка степени ковалентности.</p> |

| | | |
|---|--|---|
| 4 | Кристаллоэнергетика оксидов | Кристаллоэнергетика оксидов, подход Резницкого. Понятие энергии предпочтения. Калориметрическое определение энергий предпочтения. Расчет энергий предпочтения из диаграмм состояния. Расчет энергий предпочтения ионов из термодинамических данных. Обобщенная структурно-термодинамическая характеристика кислородного координационного полиэдра. Система согласованных энергий предпочтения в шпинелях. Уравнения регрессии для шпинелей и их использование для априорной оценки энергий предпочтения. Энергетические соотношения в перовскитах. Система согласованных энергий предпочтения. Уравнения регрессии для перовскитов и их использование для априорной оценки энергий предпочтения. Энергетическая толерантность оксидов. |
| 5 | Кристаллохимический дизайн неорганических соединений | Принципы кристаллохимического дизайна неорганических соединений на примере структурного типа перовскита. Факторы, обуславливающие формирование структур неорганических соединений: природа химической связи, координационные предпочтения, размерный фактор. Условия формирования структурного типа перовскита АВО ₃ (влияние размерного фактора, температура и давления). Политипизм перовскитоподобных структур. Структуры двойного перовскита (криолит, эльпасолит), реализация различных типов упорядочения в катионной подрешетке. Перовскитоподобные фазы со структурным разупорядочением в подрешетке кислорода AnBnO _{3n-m} , структурный типа браунмиллерита A ₂ B ₂ O ₅ . Катионодефицитные перовскиты. Изо- и гетеровалентные замещения в перовскитоподобных структурах. Гомологические ряды, образуемые структурами срastания. Факторы, определяющие возможность образования структур срastания. |

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Элементы теоретической неорганической химии

Электронные ресурсы (издания)

1. Менделеев, Д. И.; Периодический закон : сборник научных трудов.; Издательство Академии Наук СССР, Москва; 1958; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=427193> (Электронное издание)
2. Журавлев, Ю. Н.; Химическая связь в полупроводниковых и диэлектрических кристаллах : учебное пособие.; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232672> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Дей, К. М., Клайд М., Лидин, Р. А., Селиванова, А. С., Иванова, Е. К., Астахов, К. В.; Теоретическая неорганическая химия; Химия, Москва; 1969 (21 экз.)
2. Дей, К. М., Клайд М., Иванова, Е. К., Астахов, К. В.; Теоретическая неорганическая химия; Химия, Москва; 1976 (12 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Springer Materials <https://materials.springer.com/>

Web of Science <http://apps.webofknowledge.com/>

ScienceDirect Freedom Collection <http://www.sciencedirect.com/>

eLibrary ООО Научная электронная библиотека <http://elibrary.ru>

Wiley Journal Database <http://onlinelibrary.wiley.com/>

Журнал физической химии / Науч.-техн. упр. ВСНХ СССР .— М. ; Л. : Гос. изд-во, 1930- .— Ранее выходил как: Журнал русского физико-химического общества. Часть химическая .— В 1930-Т. 5, Вып. 2-3 (1934) является "Серией В" "Химического журнала" .— Основан в 1930 г. — Выходит ежемесячно .— ISSN 0044-4537 .— <URL:<https://dlib.eastview.com/browse/publication/79384>>.

Неорганические материалы : [журнал] / Акад. наук СССР .— М. : Наука, 1991- .— Заглавие: Т. 1 (1965)-27, № 6 (1991) Известия Академии наук СССР. Неорганические материалы ; Т. 27, № 7 (1991) - Неорганические материалы, ISSN 0002-337X .— Выходит ежемесячно .— ISSN 0002-337X .— <URL:<https://dlib.eastview.com/browse/publication/79441>>.

Вестник Московского университета : науч. журн. Сер. 2. Химия / Моск. гос. ун-т, Хим. фак. — М. : Изд-во Моск. гос. ун-та, 1960- .— Образовался в результате разделения Сер. Математика, механика, астрономия, физика, химия на 3 серии: Сер. Математика, механика, Сер. Химия, Сер. Физика, астрономия. Счет порядкового года изд. каждой серии ведется с начала издания "Вестника . " .— Основан в 1946 г. — Выходит 6 раз в год .— ISSN 0201-7385 .— ISSN 0579-9384 .— <URL:https://biblioclub.ru/index.php?page=journal_red&jid=596011>

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

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Элементы теоретической неорганической химии

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 |
|-------|--------------|---|---|
| | | | |

| | | | |
|---|---|--|--|
| 1 | Лекции | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 2 | Практические занятия | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 3 | Консультации | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 4 | Текущий контроль и промежуточная аттестация | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 5 | Самостоятельная работа студентов | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов | Не требуется |

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 | доктор физико- математических наук, профессор | Профессор | Кафедра департамент фундаментальной и прикладной химии |

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Сафронов Александр Петрович, Профессор, Департамент фундаментальной и прикладной химии

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

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 |

| | | |
|---|--|---|
| | | <p>функция электронной конфигурации молекулы, ее симметрия. Интеграл момента перехода и его компоненты.</p> |
| 2 | <p>Приближенные методы квантовой химии</p> | <p>Электронное строение сложных молекул. Варианты расчетной реализации метода Рутана. Базис решения. Слейтеровские и гауссовы орбитали, их особенности. Оптимизация геометрии стационарного состояния молекул в рамках квантовых расчетов. Электронные конфигурации молекул, конфигурационное взаимодействие.</p> <p>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 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 | <p>Теоретическое описание взаимодействия молекул</p> | <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</p> |

| | | |
|--|--|---|
| | | 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. |
|--|--|---|

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовая химия

Электронные ресурсы (издания)

1. Громова, Е. Ю.; Строение атома. Химическая связь : учебное пособие.; Казанский научно-исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань; 2017; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=500901> (Электронное издание)
2. Грей, Г., Г., Дяткина, М. Е.; Электронная и химическая связь : учебное пособие.; Мир, Москва; 1967; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=222465> (Электронное издание)
3. Герцберг, Г., Г., Кондратьев, В. Н.; Спектры и строение двухатомных молекул; Изд-во иностр. лит., Москва; 1949; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=255713> (Электронное издание)
4. Крашенинин, В. И.; Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие.; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2012; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Степанов, Н. Ф.; Квантовая механика молекул и квантовая химия : Учеб. пособие: для хим. спец. вузов.; Изд-во Моск. ун-та, Москва; 1991 (36 экз.)
2. Степанов, Н. Ф.; Квантовая механика и квантовая химия : [Учеб. для вузов].; Мир, Москва; 2001 (71 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

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

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовая химия

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 |
|-------|---|---|--|
| 1 | Лекции | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 2 | Лабораторные занятия | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 3 | Консультации | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 4 | Текущий контроль и промежуточная аттестация | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 5 | Самостоятельная работа студентов | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов | Не требуется |

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Математическая обработка результатов
измерений

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

| № п/п | Фамилия Имя Отчество | Ученая степень, ученое звание | Должность | Подразделение |
|--------------|------------------------------|---|------------------|-----------------------------------|
| 1 | Лебедева Елена Леонидовна | кандидат химических наук, без ученого звания | Доцент | Кафедра аналитической химии |

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Лебедева Елена Леонидовна, Доцент, аналитической химии и химии окружающей среды

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

| Код раздела, темы | Раздел, тема дисциплины* | Содержание |
|-------------------|---|--|
| 1 | Элементы теории измерений | Физические величины. Единицы величин. Международная система единиц. Измерение. Погрешности измерений. Средства измерений. Методики измерений. |
| 2 | Точность результатов измерений | Понятие точности результатов измерений и её составляющие. Способы выражения точности – погрешность и неопределённость, методы их оценки. Источники погрешностей при химических измерениях. |
| 3 | Элементы математической статистики | Генеральная совокупность и выборка. Статистические модели. Случайные величины и некоторые виды их распределений. Сравнение дисперсий нескольких выборок. Проверка гипотезы о равенстве математических ожиданий. Сложение погрешностей. |
| 4 | Корреляционный и регрессионный анализ | Корреляция и ковариация. Линейная регрессия. Метод наименьших квадратов. Нелинейные и многомерные регрессии. Метод проекции на латентные структуры. |
| 5 | Планирование эксперимента | Поиск оптимальных условий. Одно- и многофакторные эксперименты. |
| 6 | Методики количественного химического анализа (МКХА) | Показатели качества МКХА. Разработка и аттестация МКХА. Применение МКХА в лабораториях. Внутрिलाбораторный контроль качества результатов измерений. Представление результатов измерений. |

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Математическая обработка результатов измерений

Электронные ресурсы (издания)

1. Ананьев, В. А.; Анализ экспериментальных данных : учебное пособие. 1. ; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232208> (Электронное издание)
2. Юдин, Ю. В., Попова, А. А.; Организация и математическое планирование эксперимента : учебное пособие.; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2018; <http://www.iprbookshop.ru/106473.html> (Электронное издание)
3. Шурыгина, Л. И.; Методы оптимизации химического эксперимента : учебное пособие. 1. Статистический анализ эксперимента; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2009; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232734> (Электронное издание)
4. Шурыгина, Л. И.; Методы оптимизации химического эксперимента : учебное пособие. II. Регрессионный анализ и статистическое планирование эксперимента; Кемеровский государственный университет, Кемерово; 2011; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232735> (Электронное издание)
5. Назина, Л. И.; Планирование и организация эксперимента: лабораторный практикум : практикум.; Воронежский государственный университет инженерных технологий, Воронеж; 2019; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=601551> (Электронное издание)
6. Осипенко, С. А.; Статистические методы обработки и планирования эксперимента : учебное пособие.; Директ-Медиа, Москва, Берлин; 2020; <https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=598682> (Электронное издание)
7. Медведев, П. В.; Математическая обработка результатов исследования : учебное пособие.; Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, Оренбург; 2017; <http://www.iprbookshop.ru/78785.html> (Электронное издание)

Печатные издания

1. Смагунова, А. Н.; Методы математической статистики в аналитической химии : учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 - химия и по направлению 020100.62 - химия.; Феникс, Ростов-на-Дону; 2012 (75 экз.)
2. Чарыков, А. К.; Математическая обработка результатов химического анализа. Методы обнаружения и оценки ошибок : [учебное пособие для химических специальностей вузов.]; Химия, Ленинградское отделение, Ленинград; 1984 (23 экз.)
3. Рего, К. Г.; Метрологическая обработка результатов технических измерений : Справ. пособие.; Техника, Киев; 1987 (12 экз.)
4. Степанова, Е. А., Степанова, Е. А.; Основы обработки результатов измерений : [учебное пособие для студентов, обучающихся по программе бакалавриата по направлениям подготовки 27.03.01

"Стандартизация и метрология", 28.03.01 "Нанотехнология микросистемная техника", 03.03.02 "Физика".; Издательство Уральского университета, Екатеринбург; 2014 (100 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

Электронно-библиотечная система "Лань" <https://e.lanbook.com/>

Техэксперт (Кодекс) <http://sk5-410-lib-te.at.urfu.ru/docs/>

ФГИС "АРШИН" <https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry>

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

<https://fgis.gost.ru/fundmetrology/registry>

<https://www.google.com/>

<https://scholar.google.com/>

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Математическая обработка результатов измерений

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 |
|--------------|----------------------|--|--|
| 1 | Лекции | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 2 | Практические занятия | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES |
| 3 | Консультации | Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в | Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc |

| | | | |
|---|---|--|---|
| | | <p>соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> <p>Доска аудиторная</p> | <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> |
| 4 | Текущий контроль и промежуточная аттестация | <p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Рабочее место преподавателя</p> | <p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> |
| 5 | Самостоятельная работа студентов | <p>Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов</p> <p>Персональные компьютеры по количеству обучающихся</p> <p>Подключение к сети Интернет</p> | <p>Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc</p> <p>Office 365 EDUA3 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES</p> |