

МИНОБРНАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

Строение вещества

Направление подготовки
04.03.01 Химия

Квалификация (степень) выпускника
Бакалавр

Форма обучения
очная

Томск – 2015

1. Код и наименование дисциплины (модуля) Б1.В.ОД.1 «Строение вещества».

2. Цель изучения дисциплины (модуля)

Ознакомление студентов с понятийным аппаратом и основными закономерностями строения вещества, с проблемой установления связи между строением вещества, его физико-химическими свойствами и реакционной способностью, а также получение фундаментальных и практических навыков исследований молекул и молекулярных систем современными физическими методами.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения.

Например: 3 год, 2 семестр.

4. **Общая трудоемкость дисциплины (модуля)** составляет 5 зачетных единиц, 180 часов, из которых 80 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (32 часа – занятия лекционного типа, 48 часов – занятия семинарского типа), 64 часа составляет самостоятельная работа обучающегося, 36 ч на подготовку к экзамену.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (разделу)
ОПК-1 – Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Знать: теоретические основы науки о строении вещества, область применения физических методов и их возможностей при исследовании вещества Уметь: применять физические методы исследования в химии, систематизировать данные с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках науки о строении вещества; решать типовые задачи по строению вещества, анализировать результаты измерений физико-химических характеристик, полученных физическим методом. Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным разделам науки о строении вещества, математическим аппаратом при вычислениях физических характеристик вещества

6. Содержание дисциплины (модуля) и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

№ п/п	Раздел Дисциплины	ВСЕГО	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (часах)		
				Лек- ции	Практ.	СРС
1	Цели и задачи ФМИ роль, место каждого,	6	1	2	2	2
2	<u>Микроволновая спектроскопия.</u> Модель жесткого ротатора. Устройство радиоспектрометра. Вращат. спектры КР	8	2	2	2	4
3	<u>Колебание</u> гармонический и ангармонический осциллятор. Колебательные спектры КР. Техника ИК- и КР- спектроскопии.	12	3 9	2	2 4	4
4	Электронные спектры поглощения, параметры, флуоресценция, параметры. Принцип Ф-К. Триплеты	14	4 10	2	4 4	4
5	Вынужденное излучение, принцип действия лазера, применение. Поляризация люминесценции.	12	5 11	2	2 2	6
6	Методы масс- спектрометрии.	16	6 12- 13	2	2+2 4	6
7	Резонансные методы исследования, спектры ЯМР, ЭПР, ЯКР, ЯГР	16	7 14- 15	2	2+2+2 4	4
8	Рентгеноструктурн ый анализ,	14		2		

	дифракционный предел измерения. Нанотехнологии и измерения.		8 16		2+2 2+2	4
9	Типы химических частиц. Радикалы. Методы изучения геометрии в различных фазовых состояниях.	6	9	2		4
10	Метод фотоэлектронной спектроскопии. Энергии реорганизации и корреляции	6	10	2		4
11	Нежесткие молекулы. Временной фактор при определении структуры молекул	8	11	2		6
12	Туннельный механизм превращений структурно нежестких молекул	8	12	2		6
13	Методы исследования структурно нежестких молекул	8	13	2		6
14	Нанохимия. Свойства наночастиц. Наночастицы на основе углерода	6	14	2		4
15	Супрамолекулярная химия. Процессы, обеспечивающие функционирование супрамолекулярных устройств	8	15	4		4
	Всего	144		32	48	64
	Подготовка к экзаменам					36
	итого	180		32	48	100

6.2. Содержание дисциплины

Физические методы исследования строения вещества

Предмет и задачи элементов строения вещества. Основные разделы науки о строении вещества.

• **Введение. Наука о строении вещества: предмет и значение.** Изучение этого раздела науки о веществе имеет большое значение для общетеоретической подготовки химика, делает его способным к восприятию новых идей, на которых строятся современные химические технологии.

Раздел 1. Цели и задачи физических методов исследования строения вещества. Характеристика и роль различных методов. Шкала электромагнитных волн, роль и место разных спектроскопических методов исследования в этой шкале, краткая характеристика каждого. Характеристичное время метода, понятие корректности задачи в изучении строения вещества. Достижения и перспективы физических методов исследования строения вещества на данном этапе.

Раздел 2. Природа химической связи, кривая потенциальной энергии молекулярной системы, аддитивность энергии системы, понятие спектра. Микроволновая спектроскопия. Модель жесткого ротатора, вращательные спектры двухатомных и многоатомных молекул. Устройство радиоспектрометра, метод Дебая для определения дипольных моментов молекул. Чисто вращательные спектры комбинационного рассеяния, область длин волн, особенности КР-спектров.

Раздел 3. Колебание двухатомных **молекул**, кривая потенциальной энергии гармонического и ангармонического осциллятора, колебательные спектры гармонического и ангармонического осциллятора, учет вращательного движения.

Колебательные спектры многоатомных молекул, нормальные колебания и форма нормальных колебаний. Характеристические и нехарактеристические частоты. Комбинационное рассеяние света, поляризуемость молекул, стоксовы и антистоксовы компоненты спектра комбинационного рассеяния на колебательных и вращательных уровнях молекул, связь спектров со структурой вещества. Техника ИК- и КР-спектроскопии для изучения колебательного движения молекулярных систем.

Раздел 4. Электронные спектры поглощения света, характеристики поглощения: пропускание, оптическая плотность, показатель поглощения, коэффициент экстинкции, эффективное сечение поглощения, энергия кванта. Классификация электронных переходов в молекуле, свойства n -, π -, σ -, орбиталей, отнесение электронных переходов к определенному типу: по энергии и экстинкции. Спонтанное излучение света молекулами, его характеристики: интенсивность, квантовый выход излучения, радиационная константа, связь излучения с характеристиками поглощения. Примеры применения электронной спектроскопии к изучению строения вещества. Виды спектров, разделение молекул по сложности. Принцип Франка-Кондона: формулировка и следствия, формирование спектров поглощения и излучения с его учетом, стоксов сдвиг.

Раздел 5. Схема Яблонского-Теренина-Льюиса-Каша, вероятностные константы, понятие времени жизни возбужденного состояния, его связь с квантовым выходом. Понятие и свойства триплетного состояния: спин, фосфоресценция, характеристики и проявление. Техника электронной спектроскопии и люминесценции. Поляризация излучения, характеристики поляризации люминесценции. Броуновская деполяризация, применение поляризационных характеристик люминесценции к изучению строения вещества. Поляризационные спектры возбуждения в изучении структуры молекул (на примере родаминовых и трипафлавиновых красителей). Вынужденное излучение, инверсная населенность, принцип устройства лазера. Типы лазеров, их применение.

Раздел 6. Методы масс-спектрометрии. Ионы и методы ионизации, понятие сечения ионизации, достоинства и недостатки каждого метода. Принципиальная схема статического масс-спектрометра, связь массы изучаемых частиц с характеристиками прибора. Получение масс-спектра, его характеристики: 1) продольная фокусировка,

2) разрешающая сила, 3) чувствительность. Типы динамических масс-спектрометров: времяпролетный, квадрупольный, циклотронный – их возможности, особенности, достоинства и недостатки.

Раздел 7. Резонансные методы исследования, их особенность, спектры ЯМР, связь константы экранирования и химического сдвига со структурой соединения. Спектры ЯКР, область и возможность изучения структуры. ЯГР, эффект и спектры Мессбауэра, связь со структурой. Спектры ЭПР, принцип получения и характеристики, связь спектров со структурой вещества.

Раздел 8. Рентгеноструктурные исследования, условие Брэгга, связь интенсивности рассеяния со структурой кристаллической решетки, содержащей разные атомы. Принципиальная схема рентгеновского дифрактометра, измеряемые параметры, дифракционный предел определения микро размеров.

Раздел 9. Нанотехнологии и измерения. Электронный микроскоп, принцип устройства ПЭМ, СЭМ, характеристики и возможности: разрешение, ограничения в использовании. Зондовые микроскопы, характеристики и возможности: принцип работы сканирующего туннельного микроскопа - СТМ, атомно-силового микроскопа - АСМ, сканирующего оптического микроскопа ближнего поля – СОМБП, разрешение, ограничения и возможности.

Раздел 10. Типы химических частиц. Радикалы. Методы изучения геометрии в различных фазовых состояниях. Типы химических частиц. Молекулы, ионы, свободные радикалы. Их признаки и свойства. Примеры относительно стабильных радикалов. Причины их сравнительной устойчивости. Стереохимия. Молекулярная структура. Атомарная (геометрическая) и электронная структура. Конформации. Методы изучения геометрии молекул в различных фазовых состояниях. Влияние кристаллического поля на конформации молекул. Метод валентных связей. Достоинства и недостатки метода ВС. Метод молекулярных орбиталей. Приближенное описание молекулярной орбитали в методе МО ЛКАО. Минимальный базис. Расширение базиса. Достоинства и недостатки метода МО ЛКАО. Энергия корреляции электронов. Открытые и закрытые оболочки молекул. Сравнение методов. Три основные группы современных квантовохимических методов.

Раздел 11. Метод фотоэлектронной спектроскопии. Энергии реорганизации и корреляции. Метод фотоэлектронной спектроскопии – метод изучения электронного строения атомов и молекул. Фотоэлектрический эффект. Потенциал ионизации. Рентгеновская ФЭС. Достоинства метода ФЭС. Общий вид фотоэлектронного спектра. Происхождение структуры фотоионизационных полос. Адиабатический и вертикальный потенциалы ионизации. Теорема Купманса. Границы ее применимости. Источники ошибок в методе ФЭС. Энергия реорганизации электронов. Энергия корреляции. Достоинства метода ФЭС. Источники УФ излучения для метода ФЭС. Химические сдвиги. Источники ошибок в методе ФЭС. Области применения методов ФЭС и РФЭС.

Раздел 12. Нежесткие молекулы. Временной фактор при определении структуры молекул. Величины, определяющие геометрическую конфигурацию молекулы. Кристаллографические банки данных. Определение изомерии по Берцелиусу и Руври. Нежесткие молекулы. Временной фактор при определении структуры молекул. Характеристическое время (или временное разрешение) метода. Таутомерия. Типы прототропной таутомерии. Аниотропная таутомерия. Примеры таутомерных превращений.

Раздел 13. Туннельный механизм превращений структурно нежестких молекул. Туннельный механизм превращений структурно нежестких молекул. Условие преобладающего вклада туннелирования. Влияние симметрии потенциального барьера на вероятность туннелирования. Основные типы структурной нежесткости. Зависимость потенциальной энергии молекулы от инверсионной координаты. Политопные перегруппировки. Тригонально-пирамидальные молекулы AL_3 . Зависимость барьера

инверсии от индивидуальной природы A и L. Методы исследования структурно нежестких молекул. Зависимость спектра ЯМР нежестких молекул от температуры.

Раздел 14. Методы исследования структурно нежестких молекул. Изучение внутреннего вращения различными методами. Инверсия 4-х и 6-ти членных циклов. Цис – транс изомерия. Изомеры природных соединений. Число возможных геометрических изомеров для несимметричной цепи с n двойными связями. Изомерия координационных соединений. Лигандные изомеры. Аллогональные изомеры. Спиновые изомеры. Электронная природа структурной нежесткости. Нежесткие координаты. Стереохимически и электронно нежесткие системы. Вид волновой функции для электронно нежестких систем. Оптические изомеры или энантиомеры – частный случай стереоизомеров. Особенности строения хиральных молекул. Признаки хиральности. Однозначный критерий хиральности. Проблема хиральности. Хиральность и экологическая безопасность.

Раздел 15. Нанохимия. Свойства наночастиц. Наночастицы на основе углерода. Нанохимия. Свойства наночастиц. Размерные эффекты в нанохимии. Методы исследования наночастиц. Нанотрубки. Наночастицы на основе углерода. Зависимость масс-спектров от условий кластеризации. Фуллерены – новые аллотропные модификации углерода.

Метод получения макроскопических количеств фуллеренов. Свойства фуллеренов. Химическая стабильность четных и нечетных структур. ИК-, КР-спектры фуллеренов и их электронные спектры поглощения. Окисление фуллеренов. Частично радикальный характер молекул фуллеренов. Химическая связь в объемных карбофуллеренах. Главные факторы, определяющие особенности связи в каркасных и циклических структурах. Псевдоароматичность. Соединения включения. Новый углеродный наноматериал графен. Строение и свойства. Возможные области применения.

Раздел 16. Супрамолекулярная химия. Процессы, обеспечивающие функционирование супрамолекулярных устройств. Супрамолекулярная химия. Супрамолекулярные системы и их свойства. Структурные единицы супрамолекулы. Типы взаимодействий между компонентами супрамолекул. Основной признак супрамолекулы. Типы молекулярных устройств. Активные компоненты супрамолекулы. Новые свойства супрамолекул. Процессы, обеспечивающие функционирование супрамолекулярных устройств. Методы исследования супрамолекулярных структур. Роль мостиковых фрагментов в супрамолекулярных структурах. Способы управления молекулярными устройствами и машинами. Дендримеры. Свойства, которыми обладают дендримерные структуры. Применение дендримерных структур.

6.3. Форма промежуточной аттестации

- экзамен (6^{-й} семестр);
- зачет (6^{ой} семестр)
- сдача коллоквиумов, включающих знание и понимание теоретических вопросов (всего 2)

индивидуальные задания по темам семинарских занятий 2 для каждого студента, включающих всего 60 вопросов и задач); (4 контрольные работы)

- экспресс-контроль на каждом семинарском занятии по решению задач на заданную тему;
- тестирование по отдельным разделам строения вещества и в целом по курсу;
- 4 контрольные работы;
- Итоговая оценка складывается из результатов выполнения всех видов учебной работы.

7. Ресурсное обеспечение:

7.1. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1.1. Рекомендуемая литература

а) основная литература:

1. Пентин Ю.А., Курамшина Г.М. Основы молекулярной спектроскопии./Ю.А. Пентин, Г.М. Курамшина; М.: МИР, БИНОМ, 2008. –398 с.
2. Кобаяси Н. Введение в нанотехнологию. / Н.Кобаяси М.: БИНОМ, 2007. –134 с.: ил

б) дополнительная литература:

1. Теренин А.Н. Фотоника молекул красителей/ А.Н.Теренин.–Л: Наука, 1967.–616 с.
2. Ю. Беккер. Спектроскопия. (перевод с немецкого) / Ю. Беккер.– М.: Техносфера, 2009.–528 с.
3. Мелихов И.В. Физикохимия наносистем: успехи и проблемы // Вестник РАН.– 2002.– Т. 72.– № 10. –С.. 900-909.
4. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии/ Дж..Лакович. М. :Мир, 1986. –496 с.
5. Левшин Л.В., Салецкий А.М. Люминесценция и ее измерение./Л.В.Левшин и др. М: МГУ, 1989. –255 с.
6. Трофимова Т.И. Оптика и атомная физика: законы, проблемы, задачи/ М. : Высшая школа, 1999. –288с.
7. Минкин В.И. Теория строения молекул/ В.И Минкин, Б.Я.Симкин и др.. Ростов-на Дону: Издат.Феникс, 1997, 560 с.
8. Спектроскопия в органической химии. Сборник задач: [учеб.-метод. пособие для вузов по специальности „Химия“] / В.Я. Миронов, С.А Янковский. – М. Химия, 1985. – 232 с.

7.1.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

<http://www.chem.mgu.su;>
<http://www.misis.ru>
bio.sfu-kras.ru
<http://www.chem.spbu.ru;>

8. Преподаватели, авторы программы

Доктор физ.-мат. наук, профессор И.В. Соколова, доктор физ.-мат. наук, профессор Р.Т. Кузнецова, канд. физ.-мат. наук, доцент О.К. Базыль, канд. физ.-мат. наук, доцент Л.Г. Самсонова