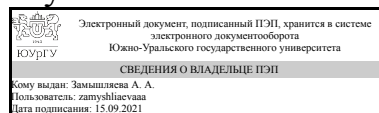


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Директор института
Институт естественных и точных
наук



А. А. Замышляева

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины П.1.В.06.02 Современная теория химической связи
для направления 04.06.01 Химические науки

уровень аспирант **тип программы**

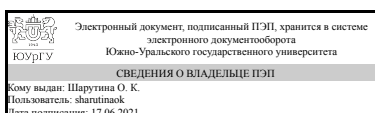
направленность программы

форма обучения очная

кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

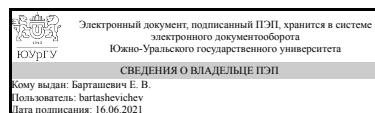
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, утверждённым приказом Минобрнауки от 29.07.2014 № 869

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
д.хим.н., доц., профессор



Е. В. Барташевич

1. Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины - выработать компетенции и сформировать навыки по классификации химических связей в органических, неорганических, элементоорганических соединениях, по установлению типа связи и умению находить критерии того или иного типа связи между атомами или ионами. Задачи: помочь овладеть современными знаниями о развивающихся новейших концепциях теории строения химических соединений. Дать представления о новейших современных концепциях нековалентных взаимодействий в конденсированных состояниях вещества, определяющих физико-химические свойства соединений и влияющие на свойства материалов.

Краткое содержание дисциплины

Типы химических связей. Исторически сложившиеся концепции ковалентных и ионных взаимодействий. Классификация типов связей. Эволюция понятий "донорно-акцепторное взаимодействие", "комплекс с переносом заряда". Современная концепция и классификации ковалентных взаимодействий: понятие связей со смещенным зарядом, инструменты их описания. Использование теории функционала плотности для описания электрон-электронных взаимодействий, электрон-ионных взаимодействий. Современная концепция и классификации нековалентных взаимодействий: галогенные, халькогенные, пниктогенные, тетрельные, водородные связи. Особенности компьютерного моделирования изолированных молекул и молекулярных кластеров в задачах оценки силы и особенностей нековалентных взаимодействий. Особенности компьютерного моделирования периодических систем в задачах описания нековалентных взаимодействий в молекулярных кристаллах. Свойства электронной плотности в описании свойств химических связей: индексы порядков связей, индексы делокализации электронов. Квантовая теория атомов в молекулах (QTAIM) в описании локальных свойств плотности для характеристики химических связей.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУНы)
УК-1 способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Знать: Источники информации, наименования научных журналов, в которых публикуются теоретические аспекты свойств химических связей.
	Уметь: Находить нужную информацию и источники данных в сети и в библиотеках.
	Владеть: Методами статистической обработки расчетных данных.
ПК-2.2 знанием общих законов, определяющих строение веществ, свойства химических связей и нековалентных взаимодействий; количественные взаимосвязи между химическим составом, структурой вещества и его физико-химическими свойствами	Знать: Методы теории функционала плотности DFT, теории возмущения MP2.
	Уметь: Производить оптимизацию геометрии молекул и их кластеров, производить расчеты электронных свойств.
	Владеть: Разбираться в функционалах и базисных

наборах, поправках на дисперсионные взаимодействия.

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук (5 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Знание основ планирования эксперимента, представлений о классах, строении, реакционной способности химических соединений. Умение проводить квантово-химические расчеты строения атомно-молекулярных систем, получения волновой функции. Навыки преобразования волновой функции, получаемой в квантово-химических расчетах для построения распределения электронной плотности, необходимые для анализа свойств химических связей.

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч.

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		2
Общая трудоёмкость дисциплины	108	108
<i>Аудиторные занятия:</i>	40	40
Лекции (Л)	40	40
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	68	68
Написание реферата	41	41
Подготовка к экзамену	27	27
Вид итогового контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен

5. Содержание дисциплины

№	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по
---	----------------------------------	-----------------------------

раздела		видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Типы химических связей	12	12	0	0
2	Современная классификация нековалентных взаимодействий в химических соединениях	18	18	0	0
3	Инструменты оценки свойств химических связей	10	10	0	0

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1	1	Исторически сложившиеся концепции химической связи	4
2	1	Ковалентные связи	4
3	1	Нековалентные взаимодействия	4
4	2	Современная концепция нековалентных взаимодействий	2
5	2	Галогенные связи	4
6	2	Халькогенные связи	2
7	2	Пниктогенные связи	4
8	2	Тетрельные связи	2
9	2	Водородные связи	4
10	3	Оценка свойств химических связей	2
12	3	Описание делокализации электронной плотности	4
13	3	Локальные свойства электронной плотности в описании химических связей	4

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС		
Вид работы и содержание задания	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц)	Кол-во часов
Подготовка к экзамену	R.M.Martin, Electronic structure. Basic theory and practical methods. Cambridge University Press. 2008. А.А. Валуев, Г.Э. Норман, В.Ю. Подлипчук, Метод молекулярной динамики: теория и приложения // В сб. «Математическое моделирование. Физико-химические свойства вещества». М.: Наука, 1989. С. 5-40. В.А. Аветисов, А.Х. Биккулов, А.П. Зубарев, Д.А. Мешков, Многомасштабное математическое моделирование молекулярных машин: проблемы и современные подходы. // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. Цирельсон В. Г. Квантовая химия.	27

	Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.:Бином, 2014. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. М.: Научный Мир, 2013.	
Подготовка к текущему контролю: написание реферата	А.А. Валуев, Г.Э. Норман, В.Ю.Подлипчук, Метод молекулярной динамики: теория и приложения // В сб. «Математическое моделирование. Физико-химические свойства вещества». М.: Наука, 1989. С. 5-40. В.А. Аветисов, А.Х. Бикулов, А.П. Зубарев, Д.А. Мешков, Многомасштабное математическое моделирование молекулярных машин: проблемы и современные подходы. //Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.:Бином, 2014.	41

6. Инновационные образовательные технологии, используемые в учебном процессе

Инновационные формы учебных занятий	Вид работы (Л, ПЗ, ЛР)	Краткое описание	Кол-во ауд. часов
Круглый стол	Лекции	Обсуждение новейших публикаций в научных журналах, близких к теме текущих лекций	6

Собственные инновационные способы и методы, используемые в образовательном процессе

Инновационные формы обучения	Краткое описание и примеры использования в темах и разделах
Лекции приглашенных ученых	Лекция профессора Masunov из университета Центральной Флориды (on-line)

Использование результатов научных исследований, проводимых университетом, в рамках данной дисциплины: Использование результатов научных исследований, проводимых университетом, в рамках данной дисциплины: 1. Проект по гранту РФФИ № 14-03-00961 Природа галогенных связей в молекулярных комплексах и кристаллах органических полигалогенидов различного стехиометрического состава. 2. Государственное задание 2014106-ГЗ № 729 Дескрипторы структурообразующих взаимодействий на основе электронной плотности в полигалогенидных периодических системах.

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

Наименование разделов дисциплины	Контролируемая компетенция ЗУНы	Вид контроля (включая текущий)	№№ заданий
Типы химических связей	ПК-2.2 знанием общих законов, определяющих строение веществ, свойства химических связей и нековалентных взаимодействий; количественные взаимосвязи между химическим составом, структурой вещества и его физико-химическими свойствами	Проверка и обсуждение реферата (текущий)	Написать реферат, раскрыть классифицирующие признаки в описании свойств химических связей
Все разделы	УК-1 способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Экзамен (Промежуточная аттестация)	Задание 1, Задание 2.
Все разделы	ПК-2.2 знанием общих законов, определяющих строение веществ, свойства химических связей и нековалентных взаимодействий; количественные взаимосвязи между химическим составом, структурой вещества и его физико-химическими свойствами	Экзамен	Задание 2

7.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
Проверка и обсуждение реферата (текущий)	Обсуждение классифицирующих признаков химических связей по результатам написанного реферата.	Зачтено: Тема раскрыта, все признаки типа связывания проиллюстрированы на примерах, использована литература на английском языке. Не зачтено: Тема не раскрыта, нет примеров, не использована литература на английском языке.
Экзамен (Промежуточная аттестация)	Оцениваются ответы на два вопроса в билетах	Отлично: Даны правильные ответы на два вопроса Хорошо: Дан только один правильный ответ Удовлетворительно: Оба ответа содержат ошибки Неудовлетворительно: Не дан ни один правильный ответ

7.3. Типовые контрольные задания

Вид контроля	Типовые контрольные задания
Проверка и обсуждение реферата (текущий)	Геометрические критерии галогенной, халькогенной, водородной связи. Какие из предложенных (рассмотренных) базисных наборов описывают нековалентные взаимодействия корректно?

Экзамен (Промежуточная аттестация)	1. Дайте формулировку галогенной связи. 2. Дайте формулировку пниктогенной связи 3. Дайте формулировку халькогенной связи. 4. Опишите основные признаки связей со сдвигом заряда. 5. Что такое тетрельная связь? 6. Перечислите основные характеристики химической связи. 7. Как с помощью суперпозиции градиентных полей установить, какой из атомов является акцептором электронной плотности? 8. Как одноэлектронный потенциал характеризует донора электронов в паре взаимодействующих атомов? Задание в билете_СТХС.pdf
------------------------------------	--

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.
2. Chemical reactivity theory : a density functional view Текст Р. К. Chattaraj et al.; ed. by P. K. Chattaraj. - Boca Raton et al.: CRC Press : Taylor and Francis Group, 2009

б) дополнительная литература:

1. Bechstedt, F. Semiconductor surfaces and interfaces : their atomic and electronic structures [Текст] by F. Bechstedt, R. Enderlein. - Berlin: Akademie-Verlag, 1988

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

1. Description of pnicogen bonding with the help of vibrational spectroscopy—The missing link between theory and experiment / D. Setiawan, E. Kraka, D. Cremer // Chemical Physics Letters. - 2014. - V. 614. - P. 136–142.

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Введение в хемоинформатику: учебное пособие в 4 частях. Баскин И.И., Маджитов Т.И., Варнек А.А. Казань: Изд-во Казанского университета, 2016 г., Тираж 150, ISBN 978-5-00019-694-6

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

2. Введение в хемоинформатику: учебное пособие в 4 частях. Баскин И.И., Маджитов Т.И., Варнек А.А. Казань: Изд-во Казанского университета, 2016 г., Тираж 150, ISBN 978-5-00019-694-6

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование разработки	Наименование ресурса в	Доступность (сеть Интернет /
---	----------------	-------------------------	------------------------	------------------------------

			электронной форме	локальная сеть; авторизованный / свободный до- ступ)
1	Основная литература	Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем. Учебное пособие. 2010 г. 384 с.	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Интернет / Авторизованный
2	Дополнительная литература	Новиков, А.Ф. Строение вещества (Электронные оболочки атомов. Химическая связь. Конденсированное состояние вещества). [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - СПб. : НИУ ИТМО, 2013. - 92 с.	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Интернет / Авторизованный

9. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса

Перечень используемого программного обеспечения:

1. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Crystallographic Data Centre(бессрочно)

10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лекции	407 (1а)	компьютеры