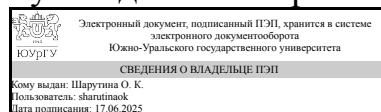


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель направления



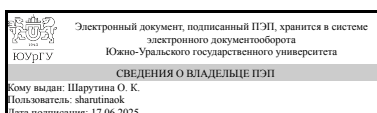
О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.О.24 Строение вещества
для направления 04.03.01 Химия
уровень Бакалавриат
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

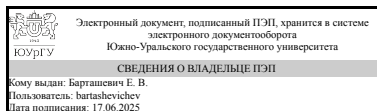
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 17.07.2017 № 671

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

Усвоение студентом теоретических представлений о строении атомно-молекулярных систем, молекулярных кристаллов, конденсированного состояния вещества, включая жидкости и твердые тела, о пространственных свойствах строения органических и неорганических соединений. Поиск взаимосвязей пространственного строения с реакционной способностью и физико-химическими свойствами вещества, а также их биологической активностью.

Краткое содержание дисциплины

Атомно-молекулярные системы как обобщенное понятие объектов, изучаемых современными химиками. Физические методы исследований, позволяющие изучать строение атомно-молекулярных систем. Компьютерный эксперимент, как объективная гипотеза о строении. Модели атомов, модели молекул. Теория отталкивания электронных пар валентной оболочки. 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.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Знает: особенности компьютерного моделирования изолированных молекул, молекулярных кластеров, периодических систем в задачах описания нековалентных взаимодействий Умеет: использовать методы молекулярной механики и квантовой химии при системном подходе для решения поставленных задач;
ПК-1 Способен использовать фундаментальные химические понятия и законы при решении профессиональных задач	Знает: методы компьютерного моделирования структуры атомно-молекулярных систем, как способа решения задач, характеризующих свойства молекул, кристаллов, полимеров Умеет: выбирать оптимальные методы компьютерного моделирования и расчетного воссоздания свойств химических соединений Имеет практический опыт: построения моделей атомно-молекулярных систем для прогнозов свойств химических соединений на основе электронных характеристик, вычисляемых методами молекулярной механики и квантовой химии

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
1.О.23 Введение в квантовую химию, ФД.04 Информационные технологии и искусственный интеллект, 1.О.12 Цифровые технологии, 1.О.10 Теория вероятностей и математическая статистика, 1.О.17 Органическая химия, 1.О.18 Физическая химия	ФД.03 Наноструктуры и нанотехнологии, Производственная практика (преддипломная) (8 семестр)

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

Дисциплина	Требования
1.О.18 Физическая химия	Знает: основные законы базовых разделов физической химии, основные термодинамические и термохимические характеристики веществ, параметры химического и фазового равновесия, кинетические параметры химических реакций и закономерности их изменения в физико-химических процессах, теоретические основы химической термодинамики и кинетики, гомогенного и гетерогенного катализа, электрохимии Умеет: использовать основные законы физической химии для анализа и интерпретации результатов экспериментов химической направленности, осуществлять эксперименты в области физической химии, на основе экспериментальных данных определять термодинамические и кинетические характеристики физико-химических процессов, применять основные законы физической химии для решения теоретических и практических задач химической направленности и анализа полученных результатов Имеет практический опыт:
ФД.04 Информационные технологии и искусственный интеллект	Знает: способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовки, базовые методы машинного обучения в задачах анализа данных и особенности их применения, а также способы осуществления сбора и подготовки данных для систем искусственного интеллекта Умеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных, классифицировать и идентифицировать задачи искусственного интеллекта; строить прогнозы на основе базовых методов машинного обучения для решения профессиональных задач Имеет практический опыт: использования современных информационных технологий и

	специализированного программного обеспечения для обработки и представления информации в задачах профессиональной деятельности
1.О.23 Введение в квантовую химию	Знает: общие принципы и методы квантовой химии Умеет: применять теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности Имеет практический опыт:
1.О.12 Цифровые технологии	Знает: основные понятия информатики; формы и способы представления данных в ЭВМ; состав, назначение функциональных компонентов и программного обеспечения ЭВМ; классификацию современных компьютерных систем; специализированные программные средства, соответствующие направлению подготовки; офисные приложенияИмеет практический опыт: обеспечения безопасности информации с помощью типовых программных средств (антивирусов, архиваторов, стандартных сетевых средств обмена информацией), способы обработки данных в электронных таблицах и в специализированных программных средствах, соответствующих направлению подготовкиУмеет: применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных Умеет: применять типовые программные средства оформления текстовой и программной документации, применять типовые и специализированные программные средства для обработки данных Имеет практический опыт: обеспечения безопасности информации с помощью типовых программных средств (антивирусов, архиваторов, стандартных сетевых средств обмена информацией)
1.О.17 Органическая химия	Знает: физические и химические свойства различных классов органических соединений, типы химических реакций в органической химии, классификацию органических соединений по классу опасности, технику безопасности при работе с ними и условия их хранения, требования к структуре и оформлению отчета по научно-исследовательской работе, особенности стиля научно-технического текста, теоретические основы органической химии Умеет: использовать знания о свойствах органических соединений и их реакционной способности для интерпретации экспериментальных данных, проводить синтез органических соединений с использованием имеющихся методик, использовать фундаментальные знания органической химии в области смежных дисциплин при решении профессиональных задач Имеет практический опыт: расшифровки результатов спектральных методов исследования органических соединений, установления строения органических

	соединений с использованием физических методов исследования, написания отчета по научно-исследовательской работе (курсовой проект)
1.О.10 Теория вероятностей и математическая статистика	Знает: определения и свойства основных понятий математической статистики, расчетно-теоретические математические методы определения предполагаемого закона распределения генеральной совокупности по выборке, проверки выдвинутой гипотезы, оценки параметров распределения, методы обработки числовых данных с использованием современной вычислительной техники Умеет: производить необходимые вычисления, в том числе с использованием современной вычислительной техники, для обработки результатов экспериментального исследования Имеет практический опыт: вычисления теоретических вероятностей случайных событий, составления законов распределения случайных величин, нахождения числовых характеристик, обработки выборок из массивов числовых данных, связанных с химическими или другими процессами, обработки выборки из массива эмпирических числовых данных и анализа полученных результатов с применением расчетно-теоретических математических методов

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 ч., 90,5 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам
		в часах
		Номер семестра
		7
Общая трудоёмкость дисциплины	144	144
<i>Аудиторные занятия:</i>	80	80
Лекции (Л)	32	32
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0
Лабораторные работы (ЛР)	48	48
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	53,5	53,5
Написание отчетов по лабораторным работам.	33,5	33,5
Подготовка к экзамену	20	20
Консультации и промежуточная аттестация	10,5	10,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Обзор теорий строения вещества и экспериментальных методов.	14	6	0	8
2	Методы компьютерного моделирования строения вещества	22	10	0	12
3	Уровень строения: электронная плотность	20	8	0	12
4	Подходы на основе молекулярной динамики	24	8	0	16

5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол- во часов
1	1	Содержание понятий “строение вещества” и “структура”.	2
2	1	Исторический обзор теорий строения вещества	4
3	2	Структурная формула и граф молекулы.	2
4	2	Внутренние координаты, геометрия молекул	2
5	2	Аддитивные схемы	4
6	2	Физико-химические методы	2
7	3	Субатомный уровень. Электронная плотность.	2
8	3	Деформационная электронная плотность, лапласиан электронной плотности.	2
9	3	Квантовая теория атомов в молекулах	4
9	4	Общие принципы молекулярной механики и квантовохимического описания молекулярных систем.	2
10	4	Теория функционала плотности	4
11	4	Нековалентные взаимодействия	2

5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

5.3. Лабораторные работы

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание лабораторной работы	Кол-во часов
1	1	Моделирование молекулярных структур	4
2	1	Топологические дескрипторы	4
3	2	Выполнение квантово-химических расчетов	4
4	2	Функционалы в методе DFT	4
6	2	Молекулярные орбитали	4
5	3	Атомные базисные наборы	4
7	3	Распределение электронной плотности в молекуле	4
9	3	Квантово-топологический анализ электронной плотности	4
8	4	Распределение молекулярного электростатического потенциала	4
10	4	Нековалентные взаимодействия	4
11	4	Конформационно подвижные молекулы	4
12	4	Молекулярная механика и молекулярная динамика	4

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Написание отчетов по лабораторным работам.	Мануал компьютерной программы ChemCraft http://www.chemcraftprog.com/description.html Строение вещества: лабораторный практикум / составители Е.В. Барташевич, С.Э. Мухитдинова. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2017. – 33с. Фортов, В. Е. Лекции по физике экстремальных состояний вещества Текст В. Е. Фортов. - М.: Издательский дом МЭИ, 2013. - 234 с. ил., цв. ил. Tian Lu, Feiwu Chen, Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer, J. Comput. Chem., 33, 580-592 (2012) http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.22885/abstract Charge decomposition analysis (CDA) module: Meng Xiao, Tian Lu, Generalized Charge Decomposition Analysis (GCDA) Method, J. Adv. Phys. Chem., 4, 111-124 (2015) http://dx.doi.org/10.12677/JAPC.2015.44013 (The generalized CDA method implemented in Multiwfn is introduced in this paper) A. Granovsky, Firefly, version 2013. http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html	7	33,5
Подготовка к экзамену	Бейдер, Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория / Р. Бейдер. – М.: Мир, 2001. – с. 10-100, 400-500. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. – М.: Бином, 2014. – все разделы.	7	20

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	7	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе №1	1	15	Лабораторная работа №1. Состоит из нескольких 4-х часовых лабораторных занятий в компьютерном классе. Всего за одну лабораторную работу можно набрать 15 баллов. Каждый успешно выполненный этап (А, В или С), лабораторной работы оценивается в 5 баллов. 1-2 балла этапа А или В снижаются за несвоевременное прикрепление файлов расчетов или	экзамен

						отчета. 1 балл может быть снижен за оформление отчета не по требованиям к ВКР. Отсутствие доклада по теме отчета, т.е. невыполнение этапа С, допускает получение нулевых баллов только за этот этап, при этом баллы за выполненные этапы А и В сохраняются. Однако не выполнение расчетов в одной из лабораторных работ (этапа А) или отсутствие отчета (этапа В) расценивается как невыполнение лабораторной работы и текущего задания курса.	
2	7	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе №2	1	15	Лабораторная работа №2. Состоит из нескольких 4-х часовых лабораторных занятий в компьютерном классе. Всего за одну лабораторную работу можно набрать 15 баллов. Каждый успешно выполненный этап (А, В или С), лабораторной работы оценивается в 5 баллов. 1-2 балла этапа А или В снижаются за несвоевременное прикрепление файлов расчетов или отчета. 1 балл может быть снижен за оформление отчета не по требованиям к ВКР. Отсутствие доклада по теме отчета, т.е. невыполнение этапа С, допускает получение нулевых баллов только за этот этап, при этом баллы за выполненные этапы А и В сохраняются. Однако не выполнение расчетов в одной из лабораторных работ (этапа А) или отсутствие отчета (этапа В) расценивается как невыполнение лабораторной работы и текущего задания курса.	экзамен
3	7	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе №3	1	15	Лабораторная работа №3. Состоит из нескольких 4-х часовых лабораторных занятий в компьютерном классе. Всего за одну лабораторную работу можно набрать 15 баллов. Каждый успешно выполненный этап (А, В или С), лабораторной работы оценивается в 5 баллов. 1-2 балла этапа А или В снижаются за несвоевременное прикрепление файлов расчетов или отчета. 1 балл может быть снижен за оформление отчета не по требованиям к ВКР. Отсутствие доклада по теме отчета, т.е. невыполнение этапа С, допускает получение нулевых баллов только за этот этап, при этом баллы за выполненные этапы А и В сохраняются. Однако не выполнение расчетов в одной из лабораторных работ (этапа А) или отсутствие отчета (этапа В)	экзамен

						расценивается как невыполнение лабораторной работы и текущего задания курса.	
4	7	Текущий контроль	Отчет по лабораторной работе №4	1	15	Лабораторная работа №4. Состоит из нескольких 4-х часовых лабораторных занятий в компьютерном классе. Всего за одну лабораторную работу можно набрать 15 баллов. Каждый успешно выполненный этап (А, В или С), лабораторной работы оценивается в 5 баллов. 1-2 балла этапа А или В снижаются за несвоевременное прикрепление файлов расчетов или отчета. 1 балл может быть снижен за оформление отчета не по требованиям к ВКР. Отсутствие доклада по теме отчета, т.е. невыполнение этапа С, допускает получение нулевых баллов только за этот этап, при этом баллы за выполненные этапы А и В сохраняются. Однако не выполнение расчетов в одной из лабораторных работ (этапа А) или отсутствие отчета (этапа В) расценивается как невыполнение лабораторной работы и текущего задания курса.	экзамен
5	7	Промежуточная аттестация	Тест по теоретическим вопросам.	-	40	Тест проводится в электронной форме по вариантам. Всего можно набрать максимум 40 баллов. Максимальный балл за каждый ответ (5) присваивается: 1) дан верный ответ, 2) определение сформулировано точно, 3) написаны формулы, там, где это требуется. Баллы снижаются 1) при наличии ошибок, или если выбраны не все правильные ответы, 2) если отсутствуют примеры или формулы. Если на какой-либо вопрос ответ отсутствует, за него присваивается 0 баллов. В каждом вопросе со множественным выбором или отнесением баллы снижаются на 50%, если дан только один из 2-х правильных ответов, снижаются до 33%, если дана только 1/3 правильных ответов.	экзамен

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
экзамен	Оценивание учебной деятельности обучающихся по дисциплине происходит на основе полученных оценок за контрольно-рейтинговые мероприятия текущего контроля. Обучающийся вправе повысить свой рейтинг, пройдя	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

	процедуру сдачи экзамена в виде электронного тестирования. На выполнение теста отводится 45 минут.	
--	---	--

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ				
		1	2	3	4	5
ОПК-3	Знает: особенности компьютерного моделирования изолированных молекул, молекулярных кластеров, периодических систем в задачах описания нековалентных взаимодействий			+	+	+
ОПК-3	Умеет: использовать методы молекулярной механики и квантовой химии при системном подходе для решения поставленных задач;	+			+	+
ПК-1	Знает: методы компьютерного моделирования структуры атомно-молекулярных систем, как способа решения задач, характеризующих свойства молекул, кристаллов, полимеров		+			
ПК-1	Умеет: выбирать оптимальные методы компьютерного моделирования и расчетного воссоздания свойств химических соединений		+			
ПК-1	Имеет практический опыт: построения моделей атомно-молекулярных систем для прогнозов свойств химических соединений на основе электронных характеристик, вычисляемых методами молекулярной механики и квантовой химии		+			

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Карапетьянц, М. Х. Строение вещества Учеб. пособие для хим. и хим.-технол. спец. вузов М. Х. Карапетьянц, С. И. Дракин. - 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Высшая школа, 1978. - 304 с. ил.

б) дополнительная 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. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с., [12] л. цв. ил. ил., табл.

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

1. Журнал «Известия Академии наук. Серия химическая» публикует работы (независимо от национальной и ведомственной принадлежности авторов) по всем направлениям химической науки, в том числе по общей и неорганической химии, физической химии, химической физике, органической химии, металлоорганической и координационной химии, химии природных соединений, биоорганической и биомолекулярной химии, химии полимеров, супрамолекулярной химии, нанохимии, химии материалов, а также статьи междисциплинарного характера.

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Барташевич, Е. В. Строение вещества [Текст] метод. указания к лаб. работам по направлению 04.03.01 "Химия" Е. В. Барташевич, С. Э. Мухитдинова ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2017. - 31, [2] с. ил. электрон. версия
2. Химия : учебник / А. А. Гуров, Ф. З. Бадаев, Л. П. Овчаренко, В. Н. Шаповал. — 4-е, изд. — Москва : МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017. — 775 с. — ISBN 978-5-7038-4728-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/106617> (дата обращения: 16.06.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Барташевич, Е. В. Строение вещества [Текст] метод. указания к лаб. работам по направлению 04.03.01 "Химия" Е. В. Барташевич, С. Э. Мухитдинова ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2017. - 31, [2] с. ил. электрон. версия
2. Химия : учебник / А. А. Гуров, Ф. З. Бадаев, Л. П. Овчаренко, В. Н. Шаповал. — 4-е, изд. — Москва : МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017. — 775 с. — ISBN 978-5-7038-4728-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/106617> (дата обращения: 16.06.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Дополнительная литература	eLIBRARY.RU	COVALENT ORGANIC FRAMEWORKS IN COMPUTATIONAL DESIGN OF SECOND-HARMONIC GENERATION MATERIALS: ROLE OF TETREL ATOMS AND THEIR INTERACTIONS. Yushina I.D., Masunov A.E., Bartashevich E.V. The Journal of Physical Chemistry A: Dynamics, Kinetics, Environmental Chemistry, Spectroscopy, Structure, Theory. 2024. Т. 128. № 38. С. 8105-8110. DOI: 10.1021/acs.jpca.4c04633 https://elibrary.ru/query_results.asp?pagenum=2

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)" -Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
2. -Firefly(бессрочно)
3. Avogadro Chemistry-Avogadro: Molecular Editor and Visualization(бессрочно)
4. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -База данных ВИНТИ РАН(бессрочно)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лабораторные занятия	707 (1)	Компьютерный класс