

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Талорский Д.А.



\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

**Программа дисциплины**  
Строение вещества Б1.Б.18

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Аналитическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Чмутова Г.А.

**Рецензент(ы):**

Антипин И.С.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 71917

Казань  
2017

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Чмутова Г.А. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Galina.Tschmutowa@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Строение вещества" является подготовка к научно-исследовательской и педагогической деятельности для решения задач, стоящих перед современной химией. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о современных концепциях строения химических соединений и возможностей их использования для понимания и прогнозирования физических свойств веществ и их реакционной способности в различных условиях.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.Б.18 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.03.01 Химия и относится к базовой (общеобразовательной) части. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина 'Строение вещества' относится к базовому блоку дисциплин. Она базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении предшествующих общих профессиональных курсов (общая химия, неорганическая химия, органическая химия, физическая химия и др.), углубляет фундаментальную естественно-научную подготовку специалистов, закладывает базу для ряда последующих специальных курсов у химиков-органиков (электронная структура органических соединений, пространственная структура органических соединений, механизмы органических реакций). Основные задачи изучения дисциплины состоят в получении студентами знаний основных современных концепций теоретической химии, знакомстве с используемыми современными терминами, характеризующими разные аспекты строения химических соединений, усвоении принципов познания строения химических соединений разных типов с помощью экспериментальных и расчетных методов, понимании связи факторов строения и среды с реакционной способностью веществ.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способностью работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОК-7 (общекультурные компетенции)	способностью к самоорганизации и самообразованию
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций (ОПК-2);
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3);

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-6 (профессиональные компетенции)	знанием норм техники безопасности и умением реализовать их в лабораторных и технологических условиях (ОПК-6).
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам (ПК-1);
ПК-3 (профессиональные компетенции)	владением системой фундаментальных химических понятий (ПК-3);
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов (ПК-4);
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий (ПК-5);
ПК-6 (профессиональные компетенции)	владением навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций (ПК-6);

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные принципы строения химических частиц, важнейшие характеристики химической, электронной и пространственной структуры устойчивых соединений и интермедиатов в химических реакциях различных типов, природу межмолекулярных взаимодействий.

2. должен уметь:

выявлять основные принципы строения химических частиц, связь между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений;

ориентироваться в особенностях химического поведения различных типов и классов химических соединений, обусловленных их строением.

3. должен владеть:

навыками анализа и установления характера структуры на основе совокупности данных о физических и химических свойствах вещества, полученных экспериментальными и теоретическими методами.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

уметь использовать свои знания на практике

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Исторический аспект. Основы современной теории химического строения.	7	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Явление изомерии. Основные понятия, термины, определения. Структурная изомерия.	7	2	2	2	0	
3.	Тема 3. Пространственная структура соединений.	7	3-4	4	4	0	
4.	Тема 4. Электронная структура соединений.	7	5-6	4	4	0	
5.	Тема 5. Геометрия молекул. Связь пространственной структуры и геометрии молекул с электронным строением.	7	7	2	2	0	контрольная работа письменное домашнее задание
6.	Тема 6. Пространственная и электронная структура "неклассических" структур и интермедиатов.	7	8	2	0	0	
7.	Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия.	7	9	2	2	0	
8.	Тема 8. Энергетические характеристики веществ и составляющих их химических частиц.	7	10	2	2	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
9.	Тема 9. Оптические свойства молекул.	7	11	2	0	0	контрольная работа коллоквиум письменное домашнее задание
10.	Тема 10. Колебательные спектры, связь со структурой.	7	12	2	2	0	
11.	Тема 11. Электронные спектры, связь со структурой.	7	13	2	2	0	
12.	Тема 12. Электрические свойства вещества и строение его молекул.	7	14	2	2	0	
13.	Тема 13. Магнитные свойства вещества и строение химических частиц.	7	15,16	4	4	0	
14.	Тема 14. Строение и реакционная способность химических соединений.	7	17,18	4	2	0	контрольная работа устный опрос тестирование
.	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	экзамен
	Итого			36	28	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

##### Тема 1. Исторический аспект. Основы современной теории химического строения.

###### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Современные представления о веществе /макротеле/ как совокупности большого числа химических частиц - молекул, атомов, радикалов и т.п. Различные уровни организации вещества /субатомный, атомный, молекулярный, надмолекулярный/ и агрегатные состояния /газообразное, жидкое, твердое/ в их связи с внутри- и межмолекулярными взаимодействиями. Развитие представлений о строении молекул и вещества в рамках разных теорий /классической теории химического строения, классической физики, квантовой механики и квантовой химии/, разные "языки" и символика, их значимость и пригодность для описания строения молекул на современном этапе развития химии.

##### Тема 2. Явление изомерии. Основные понятия, термины, определения. Структурная изомерия.

###### *лекционное занятие (2 часа(ов)):*

Понятия "структура", "строение", "конституция", "геометрия", "топология". Общность принципов строения для различных видов химических частиц. Первичная структура (конституция) как "определенная последовательность химических связей атомов". Различные виды структурной изомерии: изомерия скелета; изомерия положения заместителей, кратных связей и т.п.; изомерия, связанная с разной природой функциональных групп; внутри- и внешнесферная /ионизационная/ изомерия и т.п. Таутомерия как динамическая изомерия. Методы установления структуры молекул - физические и химические

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение задач на различные виды структурной и конфигурационной изомерии.

**Тема 3. Пространственная структура соединений.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Развитие стереохимических представлений. Форма молекул, их симметрия. Жесткие (?псевдожесткие?) и лабильные структуры. Пространственная структура молекул как совокупность "ЗК" (конституция, конфигурация, конформация). Геометрическая, оптическая, конформационная изомерия. Понятие об абсолютной и относительной конфигурации, энантиомерии и диастереомерии, рацемических модификациях и мезоформах. Конформации и конформеры, потенциальные кривые внутреннего вращения, двугранные углы, барьеры вращения, разница в энергиях между конформерами (конформационная энергия), эффективные конформации. Критерии изомерии. Номенклатура. Физические свойства и химическое поведение разных стереоизомеров.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Решение задач на различные виды конфигурационной и конформационной изомерии

**Тема 4. Электронная структура соединений.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Природа химической связи, "зарядовое распределение" как результат взаимного влияния атомов в химических частицах друг на друга, молекулярно-орбитальная структура. Классификация химических связей с точки зрения характера электронных взаимодействий: двухэлектронные двухцентровые (локализованные) и многоцентровые (делокализованные) связи. Координационная связь. Характерные особенности разных типов химической связи. "Зарядовое" распределение. Квантовохимические представления об электронных заселенностях атомов и связей, эффективных зарядах на атомах (сигма-, пи-, суммарных), порядках связей и т.п. Диаграммы распределения электронной плотности. Молекулярно-орбитальная структура химических соединений. Основные правила формирования МО. Граничные орбитали важнейших типов органических, неорганических, элементоорганических, координационных соединений. Экспериментальные и расчетные значения орбитальных энергий. Принципы изоэлектронности и изолюбальности.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Молекулярно-орбитальная структура химических соединений. Принципы составления МО-диаграмм.

**Тема 5. Геометрия молекул. Связь пространственной структуры и геометрии молекул с электронным строением.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Силовое поле молекулы. Межъядерные расстояния, валентные и двугранные углы. Тенденции в изменениях валентных углов и межъядерных расстояний в простых изоструктурных молекулах. Приближенные оценки межъядерных расстояний на основе значений ковалентных и ван-дер-ваальсовых радиусов атомов и групп. Точные значения длин связей и понятие о  $r_e$ ,  $r_0$ ,  $r_z$  и т.п. структурах. Трансферабельность (переносимость) структурных параметров. Форма простых и сложных молекул, симметрия. Концепция отталкивания валентных электронных пар и форма простых молекул. Диаграммы Уолша. Стереопределяющая роль граничных орбиталей.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение задач на связь характеристик пространственной и электронной структуры (концепция ОВЭП, геометрические параметры, барьеры внутреннего вращения и т.п.)



## **Тема 6. Пространственная и электронная структура "неклассических" структур и интермедиатов.**

### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Структура интермедиатов (неустойчивых молекул, ионов, радикалов, ион-радикалов и т.п.), возможности их экспериментального обнаружения и теоретического расчета.

## **Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия.**

### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Общность физической природы "внутримолекулярных" и "межмолекулярных" взаимодействий и законов, лежащих в основе этих взаимодействий. Универсальные межмолекулярные взаимодействия: ориентационные, индукционные, дисперсионные. Силы Ван-дер-Ваальса. Потенциал Леннарда-Джонса. Специфические межмолекулярные взаимодействия. Комплексы с водородной связью (Н-комплексы) и с переносом заряда (КПЗ), природа взаимодействий, прочность комплексов. Концепция ЖМКО. Агрегатные состояния вещества. Сольватационные эффекты, прогнозирование влияния среды на устойчивость химических частиц, физические и химические свойства веществ.

### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Взаимодействия между химическими частицами в разных агрегатных состояниях. Принцип ЖМКО.

## **Тема 8. Энергетические характеристики веществ и составляющих их химических частиц.**

### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Полная энергия молекулы как сумма кинетической энергии (поступательного движения и вращения молекулы как целого) и потенциальной энергии, т.е. энергии внутримолекулярных взаимодействий (электронной, колебательной, внутреннего вращения, ядерно-спиновых, электронно-спиновых и т.д.) при описании молекул в рамках классической физики. Вклады составляющих в полную энергию молекулы. Разбиение энергии молекулы как системы из ядер и электронов в рамках квантовохимического описания молекул на: кинетическую энергию ядер, кинетическую энергию электронов, потенциальную энергию электростатического отталкивания ядер и межэлектронного отталкивания, потенциальную энергию притяжения электронов к ядрам. Энергия (энтальпия) образования молекул из простых веществ. Энергия образования молекулы из атомов как сумма энергий, сопоставляемых отдельным связям. Средняя энергия связи, энергия диссоциации связи. Закономерности в изменениях энергии связей.

### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Важнейшие энергетические характеристики молекул и вещества. Разбиение полной энергии молекул на составляющие

## **Тема 9. Оптические свойства молекул.**

### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Взаимодействие вещества с излучением. Происхождение оптического молекулярного спектра и отдельные области последнего. Законы переходов между отдельными энергетическими уровнями, правила отбора по энергии и интенсивности, структура спектров. Связь спектральных характеристик со строением молекул (общий обзор).

## **Тема 10. Колебательные спектры, связь со структурой.**

### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Колебательные состояния и колебательные спектры. Колебания двухатомной молекулы в приближении гармонического осциллятора. Потенциал Морзе. Колебания многоатомных молекул - валентные, деформационные. Нормальные колебания. Характеристичность колебаний, групповые колебания. Инфракрасная спектроскопия поглощения. Правила отбора (положение полос и их интенсивность). Расшифровка ИК-спектров по методу характеристических частот. Применение ИК-спектроскопии в структурных исследованиях (идентификация функциональных групп и отдельных структурных фрагментов, качественный и количественный анализ многокомпонентных смесей, характер и степень координации лигандов в устойчивых комплексах, конформационный анализ, изучение межмолекулярных взаимодействий и т.д.).



**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Взаимодействие вещества с электромагнитным излучением. Электромагнитный спектр и его диапазоны. Колебательные спектры и строение молекул.

**Тема 11. Электронные спектры, связь со структурой.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Электронные состояния и электронные волновые функции молекул, их классификация, свойства симметрии. Типы переходов между электронными состояниями (молекулярными орбиталями), их энергия и вероятность. Связь характеристик электронных спектров со строением молекул. Проявление в спектрах природы сопряженных фрагментов, эффектов внутримолекулярных электронных взаимодействий, пространственных эффектов, качественный и количественный анализ многокомпонентных систем. Исследование межмолекулярных взаимодействий (водородная связь, кислотно-основное равновесие, таутомерия, комплексы с переносом заряда).

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Электронные спектры, их характеристики, связь со структурой

**Тема 12. Электрические свойства вещества и строение его молекул.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Электрический дипольный момент. Полярные и неполярные вещества. Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный момент и поляризуемость молекулы. Анизотропия поляризуемости, средняя поляризуемость. Эллипсоид поляризуемости. Связь молекулярных постоянных (дипольного момента и поляризуемости) с макроскопическими характеристиками веществ ( диэлектрической проницаемостью и показателем преломления). Уравнение Клазиуса-Моссотти-Дебая. Эффект Штарка и оценка величины и направления дипольного момента молекулы на основании данных микроволновой спектроскопии. Векторная аддитивная схема расчета дипольных моментов на основе парциальных моментов связей и структурных групп. Дипольный момент и симметрия молекулы. Дипольный момент и изомерия (геометрическая, изомерия положения, поворотная изомерия). Дипольный момент и электронные эффекты заместителей. Дипольный момент и межмолекулярные взаимодействия.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Электрические свойства вещества (дипольный момент) и строение его молекул. Связь между макро- и микрохарактеристиками вещества.

**Тема 13. Магнитные свойства вещества и строение химических частиц.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Состояние химических частиц в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Магнитная поляризация. Связь макроскопической характеристики вещества - магнитной проницаемости - с магнитными свойствами ядер и электронов. Магнитные моменты ядер и электронов. Зеемановские уровни энергии. Условия ядерного магнитного и электронного парамагнитного (спинового) резонанса. Химический сдвиг (ЯМР), его интерпретация и значение с точки зрения получения структурных данных. Эффекты ближнего и дальнего экранирования. Спин-спиновое взаимодействие и тонкая структура спектров ядерного магнитного резонанса. Интенсивности сигналов. Связь параметров ЯМР-спектров с особенностями электронной и пространственной структуры молекул.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Магнитные свойства вещества (ЯМР) и строение химических частиц.

**Тема 14. Строение и реакционная способность химических соединений.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Приближения изолированной молекулы и активного комплекса как подходы к характеристике реакционной способности вещества на основе знания строения молекул, возможных интермедиатов и активных комплексов. Прогнозирование типа реакции, направления и легкости ее протекания, наиболее вероятного механизма, хемо-, регио- и стереонаправленности и т.п. на основании "зарядового распределения", энергии, симметрии и состава граничных молекулярных орбиталей, стереохимических особенностей строения и т.д. Прогнозирование влияния среды. Связь структурных параметров с характеристиками биологической активности молекул.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Строение и реакционная способность химических соединений

### 4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

№	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Геометрия молекул. Связь пространственной структуры и геометрии молекул с электронным строением.	7	7	подготовка домашнего задания	4	домашнее задание
				подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа
9.	Тема 9. Оптические свойства молекул.	7	11	подготовка домашнего задания	2	домашнее задание
				подготовка к коллоквиуму	4	коллоквиум
				подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
14.	Тема 14. Строение и реакционная способность химических соединений.	7	17,18	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа
				подготовка к тестированию	0	тестирование
				подготовка к устному опросу	10	устный опрос
Итого					44	

### 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- компьютерные презентации ряда лекций;
- иллюстративное сопровождение лекций с помощью кодоскопа
- круглый стол (case study) по разделу 14 "Аспекты связи строение-реакционная способность".

### 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

**Тема 1. Исторический аспект. Основы современной теории химического строения.**

**Тема 2. Явление изомерии. Основные понятия, термины, определения. Структурная изомерия.**

### Тема 3. Пространственная структура соединений.

### Тема 4. Электронная структура соединений.

### Тема 5. Геометрия молекул.Связь пространственной структуры и геометрии молекул с электронным строением.

домашнее задание , примерные вопросы:

Образцы задач: 2.1. Зная, что дипольные моменты связей C-Cl и C-H составляют 2.2 и 0.4 D соответственно, вычислите дипольный момент хлористого метилена  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ .

Экспериментально определенный дипольный момент равен 1.6 D. Объясните расхождение между экспериментальной и вычисленной величинами, исходя из геометрии молекул. 2.2

Динитрил состава  $\text{C}_4\text{H}_2\text{N}_2$  имеет нулевой дипольный момент. Определите его строение. 2.3.

Сделайте правильное отнесение величин дипольных моментов : какое из значений 2.76 D и 3.24 D принадлежит бензальдегиду и какое пара-толуиловому альдегиду? Ответ мотивируйте.

2.4 Рассчитайте значение дипольного момента молекулы

4,5-дихлор-1,3-бистрифторметилбензола методом последовательного сложения векторов и с

помощью метода проекции вектора дипольного момента на оси координат. 2.5 Дипольный

момент транс-азобензола равен 0. После УФ-облучения молекула приобретает значение дипольного момента равное 3 D. Дайте соответствующие пояснения.

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе ♦ 1. В каком родстве находятся между собой следующие структуры: - орто-, мета- и пара-нитрофенолы; - (+) и (-) винные кислоты; - транс- и гош- формы

1,2-дибромэтана; + Охарактеризуйте кратко свойства структур каждого типа. 2. Используя

концепцию отталкивания валентных электронных пар, предскажите пространственную структуру следующих соединений: гидрид бериллия, дихлорид серы, гексакарбонил хрома,

триметилкарбоний- катион, трифенилметильный радикал. Что Вы можете сказать о

конформациях последнего? 3. Изобразите R- и S- конфигурационные изомеры

хлорбромметансульфо-кислоты . 4. Сопоставьте длины связей углерод-фосфор в следующих

соединениях: метилфосфин, фенилфосфин, диметилцианофосфин. Дайте необходимые

пояснения. 5. Охарактеризуйте тенденции в изменении валентных углов в гидридах кислорода, серы и селена, а также соответствующих диметиловых и дифениловых эфирах. Дайте

необходимые пояснения. 6. Одинакова ли форма молекул дихлорометана и

дихлородиамминоплатины? Какова она ? Согласуется ли с Вашим мнением тот факт, что

дихлорометан существует в одной форме, а дихлородиамминоплатина в двух ? Ответ

сопроводите изображениями соответствующих структур. Пример билета к контрольной работе

♦ 1 по ?Строению вещества? 1. В каком ?родстве? находятся между собой следующие

структуры: - орто-, мета- и пара-нитрофенолы; - (+) и (-) винные кислоты; - транс- и гош- формы

1,2-дибромэтана; + -  $\text{CH}_3\text{-COCH=C(OH)C}_2\text{H}_5$  ,  $\text{CH}_3\text{-C(OH)=CH-COC}_2\text{H}_5$ ,

$\text{CH}_3\text{-C=CH-C(OH)C}_2\text{H}_5$  | (A) (B) O- (C) ? Охарактеризуйте кратко свойства структур каждого

типа. 2. Используя концепцию отталкивания валентных электронных пар, предска-жите

пространственную структуру следующих соединений:  $\text{BeH}_2$ ,  $\text{BH}_4^-$ ,  $\text{SiCl}_2$ ,  $\text{Cr(CO)}_6$ ,  $(\text{CH}_3)_3\text{C}^+$ ,

$(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{C}^-$  ? . Что Вы можете сказать о конформациях трифенилметильного радикала? 3.

Изобразите R- и S- конфигурационные изомеры хлорбромметансульфо-кислоты . 4.

Сопоставьте длины связей углерод-фосфор в следующих соединениях:  $\text{CH}_3\text{PH}_2$ ,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{PH}_2$ ,

$(\text{CH}_3)_2\text{PC=N}$ . Охарактеризуйте тенденции в изменении валентных углов в изоструктур- ных

соединениях:  $\text{H}_2\text{E}$ ,  $(\text{CH}_3)_2\text{E}$  ,  $(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{E}$  (E=O, S, Se). Дайте необходимые пояснения. 5.

Охарактеризуйте природу граничных молекулярных орбиталей следующих соединений:

$\text{CH}_2=\text{CH}_2$  ,  $\text{CH}_2=\text{CH}^-$  ?  $\text{SCH}_3$ ,  $\text{CH}_2=\text{CH}^+$  ?  $\text{C(O)H}$ . Нарисуйте МО ? диаграммы. 6. Будут ли

обладать ароматическим характером азациклобутадиеи, циклооктатетраен, фосфабензол

(аналог пиридина), циклопентадиенил-анион, катион тропилия? Нарисуйте для этих

соединений диаграммы Фроста.

### Тема 6. Пространственная и электронная структура "неклассических" структур и интермедиатов.

### Тема 7. Межмолекулярные взаимодействия.

### Тема 8. Энергетические характеристики веществ и составляющих их химических частиц.

### Тема 9. Оптические свойства молекул.

домашнее задание , примерные вопросы:

Основные темы: Расшифровка ИК-спектров по методу характеристических частот. Применение ИК-спектроскопии в структурных исследованиях (идентификация функциональных групп и отдельных структурных фрагментов, качественный и количественный анализ многокомпонентных смесей, характер и степень координации лигандов в устойчивых комплексах, конформационный анализ, изучение межмолекулярных взаимодействий и т.д.).

коллоквиум, примерные вопросы:

Вопросы к коллоквиуму. Взаимодействие вещества с излучением. Происхождение оптического молекулярного спектра и отдельные области последнего. Законы переходов между отдельными энергетическими уровнями, правила отбора по энергии и интенсивности, структура спектров. Связь спектральных характеристик со строением молекул (общий обзор). Колебательные состояния и колебательные спектры. Колебания двухатомной молекулы в приближении гармонического осциллятора. Потенциал Морзе. Колебания многоатомных молекул - валентные, деформационные. Нормальные колебания. Характеристичность колебаний, групповые колебания. Инфракрасная спектроскопия поглощения. Правила отбора (положение полос и их интенсивность). Расшифровка ИК-спектров по методу характеристических частот. Применение ИК-спектроскопии в структурных исследованиях (идентификация функциональных групп и отдельных структурных фрагментов, качественный и количественный анализ многокомпонентных смесей, характер и степень координации лигандов в устойчивых комплексах, конформационный анализ, изучение межмолекулярных взаимодействий и т.д.).

контрольная работа, примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе ♦ 2 1. В спектре ЯМР  $^1\text{H}$  соединения  $\text{C}_{10}\text{H}_{13}\text{Br}$  присутствуют три синглета при 1,6; 3,2 и 7,3 м.д. с соотношением интегральных интенсивностей сигналов 6 : 2 : 5 соответственно. Укажите структуру бромиды и дайте необходимые пояснения. 2. Эфир бромзамещенной кислоты  $\text{C}_4\text{H}_7\text{BrO}_2$  имеет следующий спектр ЯМР  $^1\text{H}$  (, м.д.) : 1.65 (дублет); 3.4 (квадруплет); 3.85 (синглет); соотношение интегральных интенсивностей сигналов 3 : 1 : 3 соответственно. Какова структура эфира? Дайте необходимые пояснения. 3. Объясните появление пяти резонансных сигналов в спектре ЯМР  $^1\text{H}$  ацетилацетона. Определите, каким протонам они соответствуют. 4. Исходя из приведенного спектра ЯМР  $^1\text{H}$ , установите строение ненасыщенного циклического кетона. 5. Сложный эфир  $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2\text{Cl}_2$  дает в спектре ЯМР  $^1\text{H}$  следующие сигналы (, м.д.) : 1.25 (триплет); 4.35 (квадруплет); 5.95 (синглет); соотношение интегральных интенсивностей сигналов 3 : 2 : 1 соответственно. Укажите формулу вещества и дайте необходимые пояснения.

**Тема 10. Колебательные спектры, связь со структурой.**

**Тема 11. Электронные спектры, связь со структурой.**

**Тема 12. Электрические свойства вещества и строение его молекул.**

**Тема 13. Магнитные свойства вещества и строение химических частиц.**

**Тема 14. Строение и реакционная способность химических соединений.**

контрольная работа, примерные вопросы:

Пример комплексной задачи Углеводород состава  $\text{C}_8\text{H}_8$  обесцвечивает бромную воду, легко полимеризуется. УФ спектр: макс (в гексане) 244 нм ( $\lg \epsilon = 4.08$ ); 282 нм ( $\lg \epsilon = 2.65$ ). Спектры ИК- и ЯМР  $^1\text{H}$  приведены на рисунке. Определите структурную формулу соединения и дайте необходимые пояснения.

тестирование, примерные вопросы:

устный опрос, примерные вопросы:

Приближения изолированной молекулы и активного комплекса как подходы к характеристике реакционной способности вещества на основе знания строения молекул, возможных интермедиатов и активных комплексов. Прогнозирование типа реакции, направления и легкости ее протекания, наиболее вероятного механизма, хемо-, регио- и стереонаправленности и т.п. на основании "зарядового распределения", энергии, симметрии и состава граничных молекулярных орбиталей, стереохимических особенностей строения и т.д. Прогнозирование влияния среды. Связь структурных параметров с характеристиками биологической активности молекул.

**Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к экзамену:

Пример билета к экзамену по курсу "Строение вещества"

Билет

1. Геометрия молекул и параметры, определяющие ее : межъядерные расстояния, валентные углы, углы внутреннего вращения.

Закономерности в изменении этих величин. Понятия вандерваальсовых и ковалентных радиусов атомов.

2. Физические свойства вещества в их связи со строением.

Концепция "черного ящика". Понятие о прямой и обратной структурной задаче. Связь макро- и микро-характеристик.

3. Задача

Изомерные соединения А - В общей формулы  $C_4H_7OCl$  дают ряд производных : оксимы, семикарбазоны, гидразоны и имеют следующие спектры ЯМР  $^1H$  (, м.д.) : А - 2.25 (синглет); 3.0 (триплет); 3.85 (триплет); соотношение интегральных интенсивностей сигналов 3 : 2 : 2; Б - 1.65 (дублет) ; 2.25 (синглет); 4.55 (квадруплет); соотношение интенсивностей сигналов 3 : 3 : 1; В - 0.9 (триплет); 2.85 (квадруплет); 3.5 (синглет); соотношение интегральных интенсивностей сигналов 3 : 2 : 2. Назовите вещества А - В и дайте необходимые пояснения

### 7.1. Основная литература:

1. Чмутова Г.А., Курбангалиева А.Р., Казымова М.А.//Учебно- методическое пособие по курсу 'Строение вещества. Часть 1'. Казанский государственный университет, 2009.- 41 с.

2. Чмутова Г. А., Курбангалиева А. Р., Казымова М. А.

Учебно-методическое пособие по курсу 'Строение вещества'. Часть 1. [Электронный ресурс], 2009. (Для студентов химического факультета) Режим доступа: [http://kpfu.ru/docs/F1271711730/Structure\\_substance\\_2009.pdf](http://kpfu.ru/docs/F1271711730/Structure_substance_2009.pdf)

3. Чмутова, Г.А. Аспекты связи 'Строение - реакционная способность': учебное пособие / Г. А. Чмутова; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Хим. ин-т.?Казань: [Казанский (Приволжский) федеральный университет], 2010.?93 с.:

4. Сироткин О. С.Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строен. химич. соед. (осн. един. химии): Монография [Электронный ресурс] / О.С. Сироткин. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013 - 247с.

Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php?book=420415>

5. Реутов, О.А. Органическая химия. 1 ч. [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. ? Электрон. дан. ? М. : 'Лаборатория знаний' (ранее 'БИНОМ. Лаборатория знаний'), 2012. ? 568 с. ? Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=3152](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3152) ? Загл. с экрана.

6. Реутов, О.А. Органическая химия. 2 ч. [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. ? Электрон. дан. ? М. : 'Лаборатория знаний' (ранее 'БИНОМ. Лаборатория знаний'), 2012. ? 624 с. ? Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=3153](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3153) ? Загл. с экрана.



7. Реутов, О.А. Органическая химия. 3 ч. [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. ? Электрон. дан. ? М. : 'Лаборатория знаний' (ранее 'БИНОМ. Лаборатория знаний'), 2012. ? 546 с. ? Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=3154](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3154) ? Загл. с экрана.
8. Реутов, О.А. Органическая химия. 4 ч. [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. ? Электрон. дан. ? М. : 'Лаборатория знаний' (ранее 'БИНОМ. Лаборатория знаний'), 2013. ? 728 с. ? Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=3155](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3155) ? Загл. с экрана.
9. Реутов, О. А. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин .? 5-е изд. ? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014 .? ; 22 см .? (Химия) .? ISBN 978-5-94774-611-2.Ч. 1 .? [2014] .? 566, [1] с. : ил.
10. Реутов, О.А. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин .? 5-е изд. ? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014 .? ; 22 см .? (Химия) .? ISBN 978-5-94774-611-2.Ч. 2 .? [2013] .? 622, [1] с. : ил.
11. Реутов, О.А. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова .? Москва : БИНОМ, Лаборатория знаний, 2014 .? ; 22 .? (Классический университетский учебник / ред. совет: В.А. Садовничий [и др.]) .Ч. 3 .? 2-е изд. ? [2014] .? 543, [1] с.
12. Реутов, О.А. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова .? Москва : БИНОМ, Лаборатория знаний, 2014 .? ; 22 .? (Классический университетский учебник / ред. совет: В. А. Садовничий [и др.]) .Ч. 4 .? [2014] .? 722, [4] с.

## 7.2. Дополнительная литература:

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. 2-е издание. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 496 с.  
[http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=3150](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150)
2. Кочелаев, Б.И. Квантовая теория: конспект лекций / Б. И. Кочелаев; Казан. гос. ун-т, Физ. фак.-Казань: Казанский государственный университет, 2009.; Ч. 1. - 99 с.
3. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .? Казань : [Казанский университет], 2013 .? ; 20.[Ч. 1]: Компьютерное представление химических структур .? 2013 .? 173 с.
4. Якимова Л.С. Метод УФ-спектроскопии и его применение в органической и физической химии [Текст: электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / Л. С. Якимова ; Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова, Каф. орган. химии .? Электронные данные (1 файл: 0,67 Мб) .? (Казань : Казанский федеральный университет, 2015) .? Загл. с экрана .? Для 2-го семестра .? Вых. дан. ориг. печ. изд.: Казань, 2015 .? Режим доступа: только для студентов и сотрудников КФУ .? .
5. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек .? Казань : [Казанский университет], 2013 .? ; 20.Ч. 2: Химические базы данных / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т .? Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .? 185 с.
6. Современные физико-химические методы исследования в органической химии : учебно-методическое пособие к спецпрактикуму по физическим и физико-химическим методам исследования / Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова ; [авт.-сост.: к.х.н. В. А. Бурилов и др.] .? Казань : [Казанский университет], 2014 .? 131 с.

## 7.3. Интернет-ресурсы:



Dr. Richard F.W. Bader. An Introduction to the Electronic Structure of Atoms and Molecules. - : <http://www.chemistry.mcmaster.ca/esam/intro.html#Top>

Введение в стереохимию. Материалы Химического факультета МГУ, 2012. - <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/djadchenko/1.html#1>

Сетевой УМК, Общая химия, Братский госуниверситет - [http://chem-bsu.narod.ru/umk\\_chem\\_webCD/Ch2/index1.htm](http://chem-bsu.narod.ru/umk_chem_webCD/Ch2/index1.htm)

Сtereохимия - <http://ru.wikipedia.org/wiki>

Химическая связь - <http://ru.wikipedia.org/wiki/>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)**

Освоение дисциплины "Строение вещества" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "БиблиоРоссика", доступ к которой предоставлен студентам. В ЭБС "БиблиоРоссика" представлены коллекции актуальной научной и учебной литературы по гуманитарным наукам, включающие в себя публикации ведущих российских издательств гуманитарной литературы, издания на английском языке ведущих американских и европейских издательств, а также редкие и малотиражные издания российских региональных вузов. ЭБС "БиблиоРоссика" обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "Консультант студента", доступ к которой предоставлен студентам. Электронная библиотечная система "Консультант студента" предоставляет полнотекстовый доступ к современной учебной литературе по основным дисциплинам, изучаемым в медицинских вузах (представлены издания как чисто медицинского профиля, так и по естественным, точным и общественным наукам). ЭБС предоставляет вузу наиболее полные комплекты необходимой литературы в соответствии с требованиями государственных образовательных стандартов с соблюдением авторских и смежных прав.

Компьютерный проектор, кодоскоп.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки Аналитическая химия .

Автор(ы):

Чмутова Г.А. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.