

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



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Строение вещества Б3.В.1

Направление подготовки: 020100.62 - Химия

Профиль подготовки: Органическая 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 727314

Казань
2014

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 "Б3.В.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.62 Химия и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина "Строение вещества" относится к вариативной части учебного цикла Б3. "Профессиональные дисциплины". 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
ПК-6 (профессиональные компетенции)	владеет навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов
ПК-7 (профессиональные компетенции)	имеет опыт работы на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических и физико-химических исследованиях
ПК-8 (профессиональные компетенции)	владеет методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов

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	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
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 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	
9.	Тема 9. Оптические свойства молекул.	7	11	2	0	0	контрольная работа коллоквиум 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

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
	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)

N	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

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
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 CH_2Cl_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 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 диметилловых 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; + - $\text{CH}_3\text{-COCH}=\text{C}(\text{OH})\text{C}_2\text{H}_5$, $\text{CH}_3\text{-C}(\text{OH})=\text{CH-COC}_2\text{H}_5$, $\text{CH}_3\text{-C}=\text{CH-C}(\text{OH})\text{C}_2\text{H}_5$ | (A) (B) O- (C) ? Охарактеризуйте кратко свойства структур каждого типа. 2. Используя концепцию отталкивания валентных электронных пар, предска-жите пространственную структуру следующих соединений: BeH_2 , BH_4^- , SiCl_2 , $\text{Cr}(\text{CO})_6$, $(\text{CH}_3)_3\text{C}^+$, $(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{C}^-$? . 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: CH_3PH_2 , $\text{C}_6\text{H}_5\text{PH}_2$, $(\text{CH}_3)_2\text{PC}=\text{N}$. Охарактеризуйте тенденции в изменении валентных углов в изоструктур- ных соединениях: H_2E , $(\text{CH}_3)_2\text{E}$, $(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{E}$ (E=O, S, Se). Дайте необходимые пояснения. 5. Охарактеризуйте природу граничных молекулярных орбиталей следующих соединений: $\text{CH}_2=\text{CH}_2$, $\text{CH}_2=\text{CH}^-$? SCH_3 , $\text{CH}_2=\text{CH}^+$? $\text{C}(\text{O})\text{H}$. 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 ^1H 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 ^1H (, 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 ^1H ацетилацетона . Определите, каким протонам они соответствуют. 4. Исходя из приведенного спектра ЯМР ^1H , установите строение ненасыщенного циклического кетона. 5. Сложный эфир $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2\text{Cl}_2$ дает в спектре ЯМР ^1H 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 C_8H_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 ^1H 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.
Режим доступа: http://kpfu.ru/publication?p_id=28005
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 В 4 ч.: Ч.: 1: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2012.- 567 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3152
6. Реутов, О.А. Органическая химия]: В 4 ч.: Ч.: 2: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2012.-623 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3153
7. Реутов, О.А. Органическая химия В 4 ч.: Ч.: 3: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2012. -543 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3154
8. Реутов, О.А. Органическая химия В 4 ч.: Ч.: 4: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013.-722 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3155
9. Реутов, О.А. Органическая химия [Текст]: В 4 ч.: Ч.: 1: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013.- 567 с.
10. Реутов, О.А. Органическая химия [Текст]: В 4 ч.: Ч.: 2: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013.-623 с.

11.Реутов, О.А. Органическая химия [Текст]: В 4 ч.: Ч.: 3: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013. -544 с.

12.Реутов, О.А. Органическая химия [Текст]: В 4 ч.: Ч.: 4: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином,2013. -458 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

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. Компьютерное представление химических структур: учебное пособие / Т. И. Маджидов [и др.].?Казань: Казанский университет, 2013.?173 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>

Конспект лекций по Строению вещества, 2004. - http://www.msgpa.ru/sites/CHEM/ucheba/manuals/files/stroenie_veshestv.pdf

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

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

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

Химическая связь и строение молекул, Сетевой УМК - http://chem-bsu.narod.ru/umk_chem_webCD/Ch2/index1.htm

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 020100.62 "Химия" и профилю подготовки Органическая химия.

Автор(ы):

Чмутова Г.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. _____

"__" _____ 201__ г.