

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе

_____ А. М. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Автоматизация процессов и измерений в среде NI LabView»**

**Направление подготовки
04.03.01 Химия**

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры Информатики и компьютерного проектирования Новиковой Д.К.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Сколтеха **«Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии»** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение 7-го семестра.

Дисциплина **«Автоматизация процессов и измерений в среде NI LabView»** относится к части дисциплин по выбору учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области информационных технологий.

Цель дисциплины – приобретение и развитие навыков работы в среде NI LabView по созданию программного обеспечения для решения различных задач автоматизации процессов и измерений в среде LabView.

Задачи дисциплины

- изучить базовые функции среды NI LabView;
- приобрести навыки работы в данной среде.

В результате освоения дисциплины «Автоматизация процессов и измерений в среде LabView» студент приобретает следующие знания: разработка и применение специального программно-математического обеспечения для проведения исследований и решения поставленных задач, разработка собственных моделей для реализации задач автоматизации процессов и измерений.

Дисциплина **«Автоматизация процессов и измерений в среде NI LabView»** преподается в 7 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6.Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для изучения реакционной способности органических и гибридных материалов.	<i>Профессиональный стандарт</i> <i>Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономических и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- возможности и концепцию работы структур и шаблонов для разработки программного обеспечения;
- логику работы структур NI LabView;
- назначение и возможности среды NI LabView

Уметь:

- использовать структуры и шаблоны построения программного обеспечения в NI LabView;
- обосновано выбирать алгоритмические структуры NI LabView;
- создавать в NI LabView простые программы для решения задач автоматизации процессов и измерений

Владеть:

- навыками реализации виртуальных приборов и алгоритмов в NI LabView;
- навыками грамотного применения структур NI LabView;
- навыками навигации и проверки собственных моделей в среде NI LabView.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	
Самостоятельная работа	1,2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,2	0,2	0,15
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43,8	32,85
Вид контроля:			
Вид итогового контроля:	зачёт		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Сам. работа
№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лек-ции	Прак. зан.	Разр.
1.	Раздел 1. Среда NI LabView, основные функции, виртуальные приборы и концепция программирования в данной среде	22	6	6	10
1.1	Знакомство с элементами интерфейса среды NI LabView. Организация компонентов приложения. Работа с передней панелью и блок-схемой в NI LabView. Знакомство с основными инструментами среды.	4	2	2	3
1.2	Основные приемы построения моделей в NI LabView. Поиск ошибок и идентификация общих проблем организации блок-схемы и потока данных в ней.	4	2	2	3,5
1.3	Определение основных типов данных. Рассмотрение простейших тестовых разработок NI LabView.	4	2	2	3,5
2.	Раздел 2. Циклы и алгоритмические структуры NI LabView	32	10	10	12
2.1	Изучение основных алгоритмических структур в среде NI LabView. Знакомство с различными путями реализации функциональных возможностей среды NI LabView с использованием простейших алгоритмических структур.	4	2	2	3
2.2	Изучение типов циклов. Знакомство с различными путями реализации функциональных возможностей при применении циклов в среде NI LabView.	6	3	3	3
2.3	Использование циклов, построение элементарных моделей для реализации задач с применением циклов и алгоритмических структур в среде NI LabView.	10	5	5	6
3.	Раздел 3. Типы и структуры данных в среде NI LabView	32	10	10	12
3.1	Различные способы представления числовых данных.	6	2	2	2
3.2	Структуры данных. Детальное рассмотрение типов данных.	10	3	3	4

3.3	Определение типов данных. Использование определений для повышения эффективности реализации структур данных. Кластеры. Инструменты для работы с кластерами.	16	5	5	6
4.	Раздел 4. Работа с файлами	22	6	6	10
4.1	Доступ к файлам из NI LabView. Изучение базовых концепций ввода/вывода файлов и основные пути доступа к библиотекам проектов.	11	3	3	5
4.2	Передача данных между параллельными циклами. Освоение основных приемов реализации данной концепции.	11	3	3	5
	ИТОГО	108	32	32	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Среда NI LabView, основные функции, виртуальные приборы и концепция программирования в данной среде

1.1. Знакомство с элементами интерфейса среды NI LabView. Основные правила начала работы в среде NI LabVIEW. Организация компонентов приложения. Работа с передней панелью и блок-схемой в NI LabView. Простейшие способы повышения эффективности работы. Знакомство с основными инструментами среды. Пути реализации функционала инструментов среды NI LabView.

1.2. Основные приемы построения моделей в NI LabView. Виртуальные приборы. Простейшие примеры виртуальных приборов. Поиск ошибок и идентификация общих проблем организации блок-схемы и потока данных в ней. Способы решения основных ошибок и проблем организации блок-схем в среде NI LabView.

1.3. Определение основных типов данных. Изучение их теоретической основы и способы применения. Рассмотрение простейших тестовых разработок NI LabView.

Раздел 2. Циклы и алгоритмические структуры NI LabView

2.1. Изучение основных алгоритмических структур в среде NI LabView. Знакомство с различными путями реализации функциональных возможностей среды NI LabView с использованием простейших алгоритмических структур. Использование структур принятия решения. Изучение структур NI LabView, используемые для реализации алгоритмов принятия решения.

2.2. Изучение типов циклов. Знакомство с различными путями реализации функциональных возможностей при применении циклов в среде NI LabView. Приемы выполнения циклов.

2.3. Использование циклов, построение элементарных моделей для реализации задач с применением циклов и алгоритмических структур в среде NI LabView. Использование данных в разных итерациях циклов.

Раздел 3. Типы и структуры данных в среде NI LabView

3.1. Различные способы представления числовых данных. Приведение данных. Работа с текстовыми данными.

3.2. Структуры данных. Детальное рассмотрение типов данных. Операции со строками преобразование типов данных.

3.3. Определение типов данных. Использование определений для повышения эффективности реализации структур данных. Кластеры. Инструменты для работы с кластерами. Области применения этих инструментов и способы реализации их функциональных возможностей.

Раздел 4. Работа с файлами

4.1. Доступ к файлам из NI LabView. Изучение базовых концепций ввода/вывода файлов и основные пути доступа к библиотекам проектов. Высокоуровневые и низкоуровневые функции файлового ввода/вывода.

4.2. Передача данных между параллельными циклами. Освоение основных приемов реализации данной концепции. Изучение области применения данной функции и пути повышения эффективности при работе с файлами.

4.3. Управление пользовательским интерфейсом. Изучение методов программного управления атрибутами объектов передней панели.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	
	Знать:					
1	– возможности и концепцию работы структур и шаблонов для разработки программного обеспечения;	+				
2	– логику работы структур NI LabView		+			
3	– назначение и возможности среды NI LabView			+	+	
	Уметь:					
4	– использовать структуры и шаблоны построения программного обеспечения в NI LabView	+				
5	– обосновано выбирать алгоритмические структуры NI LabView		+			
6	– создавать в NI LabView простые программы для решения задач автоматизации процессов и измерений			+	+	
	Владеть:					
7	– навыками реализации виртуальных приборов и алгоритмов в NI LabView	+	+	+	+	
8	– навыками грамотного применения структур NI LabView	+	+	+	+	
9	– навыками навигации и проверки собственных моделей в среде NI LabView	+	+	+	+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>						
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения				
10	ПК-6.Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+	+
		ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+	+

		ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для изучения реакционной способности органических и гибридных материалов.	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1.1	Введение. Изучение элементов управления и интерфейса среды NI LabView. Основные принципы работы с передней панелью и блок-схемой в NI LabView.	2
2	1.2	Краткое повторение тем раздела 1.1. Основные приемы построения моделей и идентификации ошибок в NI LabView.	2
3	1.3	Изучение основных типов данных. Рассмотрение элементарных тестовых разработок NI LabView.	2
4	2.1	Краткое повторение разделов 1.2 и 1.3. Изучение базовых алгоритмических структур в NI LabView. Знакомство с различными путями реализации функциональных возможностей среды. Введение в теорию циклов в среде NI LabView.	2
5	2.2	Изучение типов циклов и методов реализации функционального потенциала среды NI LabView с применением полученных знаний.	2
6	2.3	Использование циклов в среде NI LabView. Простейшие модели с циклами	2
7	2.3	Построение элементарных моделей в среде NI LabView с применением циклов.	2
8	3.1	Повторение разделов 1.1 и 1.3. Изучение различных способов представления числовых данных в среде NI LabView.	2
9	3.2	Структуры данных. Детальное рассмотрение каждого типа.	2
10	3.3	Повторение разделов 3.1 и 3.2. Определение типов данных. Изучение путей реализации определений для повышения эффективности и качества представления данных в среде NI LabView	2
11	3.3	Повторение занятия №10. Введение в теорию кластеров. Изучение инструментов для работы с ними.	2
12	1.3-3.3	Построение виртуальных приборов. Простейшие виртуальные приборы в среде NI LabView.	2
13	4.1	Изучение концепции работы с файлами.	2
14	4.1	Доступ к файлам из NI LabView. Изучение базовых концепций ввода/вывода файлов и основные пути доступа к библиотекам данных.	2
15	4.2	Простейшие примеры передачи данных между параллельными циклами. Освоение основных приемов реализации функциональных возможностей NI LabView при работе с файлами	2
16	4.3	Пользовательский интерфейс. Способы управления.	2

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;

- посещение отраслевых выставок и семинаров;

- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;

- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 100 баллов),

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативная работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 4 контрольных работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы 25 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 8 баллов за вопрос 1,2 и 9 баллов за вопрос 3.

Вопрос 1.1.

1. Перечислить основные элементы интерфейса NI LabView.
2. Дать характеристику работы в системе программирования NI LabView.
3. Указать основные инструменты рабочей среды NI LabView.

Вопрос 1.2.

1. Дать характеристику элементов интерфейса NI LabView.
2. Привести примеры работы с передней панелью и блок-схемой NI LabView.
3. Охарактеризовать работу основных инструментов NI LabView.

Вопрос 1.3.

1. Дать определение основных типов данных.
2. Привести примеры работы числовыми данными в среде NI LabView.
3. Привести примеры простейших моделей среды NI LabView.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 8 баллов за вопрос 1,2 и 9 баллов за вопрос 3.

Вопрос 2.1.

1. Приведите пример алгоритмической структуры NI LabView.
2. Какие существуют пути реализации функциональных возможностей среды NI LabView?
3. Дайте характеристику одной из алгоритмических структур NI LabView.

Вопрос 2.2.

1. Какие типы циклов были изучены в рамках рассмотрения функциональных возможностей NI LabView?
2. Приведите пример одного из изученных циклов и пути реализации его функциональных возможностей в среде NI LabView.
3. Дайте характеристику и приведите пример применения одного из изученных ранее циклов.
- 4.

Вопрос 2.3.

1. Для каких задач следует применять циклы в среде NI LabView?
2. Опишите процесс работы с циклами в среде NI LabView.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 8 баллов за вопрос 1,2 и 9 баллов за вопрос 3.**Вопрос 3.1.**

1. Какие способы представления данных в среде NI LabView Вам известны?
2. Дайте характеристику одного из изученных типов данных.
3. Что такое массив данных?

Вопрос 3.2.

1. Какие структуры данных Вам известны?
2. Определите тип представленных данных.
3. Каким образом определение типа данных повышает эффективность реализации структур данных?

Вопрос 3.3.

1. Что такое массив данных?
2. Что такое кластеры?
3. Приведите пример задачи с кластерами.
4. Какие инструменты для работы с кластерами Вам известны?

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 4. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 8 баллов за вопрос 1,2 и 9 баллов за вопрос 3.**Вопрос 4.1.**

1. Каким образом осуществляется доступ к файлам из NI LabView.
2. Какие базовые концепции ввода/вывода данных Вам известны?
3. Получение доступа к библиотекам проектов. Привести примеры.

Вопрос 4.2.

1. Каким образом осуществляется передача данных между файлами в параллельных циклах?
2. Какие приемы реализации передачи данных между файлами в параллельных циклах.

Вопрос 4.3.

1. Область применения среды NI LabView в химической технологии.
2. Пути автоматизации процессов и измерений с применением среды NI LabView.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (7 семестр – зачёт).

Итоговый контроль по дисциплине не предусмотрен.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**9.1. Рекомендуемая литература****А. Основная литература**

1. Трэвис Дж., Кринг Дж. - LabVIEW для всех
2. Бутырин П.А., Васьковская Т.А., Каратаев В.В. – Автоматизация физических исследований и эксперимента: компьютерные измерения и виртуальные приборы на основе LabView 7.

Б. Дополнительная литература

1. Евдокимов Ю.К., Линдваль В.Р., Щербаков Г.И. – LabVIEW для радиоинженера: от виртуальной модели до реального прибора.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Новосибирск: НГТУ» ISSN 978-5-7782-1428-6

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://training-labview.ru/>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

- сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

**10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,
ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ**

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Автоматизация процессов и измерений в среде NI LabView»* проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

- Учебная аудитория для проведения лекционных и практических занятий, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.
- Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с выходом в Интернет и доступом к базам данных.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Знает, умеет, владеет необходимо заполнить в соответствии с формулировками п.2 и расстановкой по разделам п.5.

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Среда NI LabView, основные функции, виртуальные приборы и концепция программирования в данной среде	<i>Знает:</i> – возможности и концепцию работы структур и шаблонов для разработки программного обеспечения; <i>Умеет:</i> – использовать структуры и шаблоны построения программного обеспечения в NI LabView; <i>Владеет:</i> – навыками реализации виртуальных приборов и алгоритмов в NI LabView; – навыками грамотного применения структур NI LabView; – навыками навигации и проверки собственных моделей в среде NI LabView.	Оценка за контрольную работу №1 (7 семестр)
Раздел 2. Циклы и алгоритмические структуры NI LabView	<i>Знает:</i> – логику работы структур NI LabView; <i>Умеет:</i> – обосновано выбирать алгоритмические структуры NI LabView; <i>Владеет:</i> – навыками реализации виртуальных приборов и алгоритмов в NI LabView; – навыками грамотного применения структур NI LabView; – навыками навигации и проверки собственных моделей в среде NI LabView.	Оценка за контрольную работу №2 (7 семестр)
Раздел 3. Типы и структуры данных в среде NI LabView	<i>Знает:</i> – назначение и возможности среды NI LabView <i>Умеет:</i> – создавать в NI LabView простые программы для решения задач автоматизации процессов и измерений <i>Владеет:</i> – навыками реализации виртуальных приборов и алгоритмов в NI LabView; – навыками грамотного применения структур NI LabView;	Оценка за контрольную работу №3 (7 семестр)

	– навыками навигации и проверки собственных моделей в среде NI LabView.	
Раздел 4. Работа с файлами	<i>Знает:</i> – назначение и возможности среды NI LabView <i>Умеет:</i> – создавать в NI LabView простые программы для решения задач автоматизации процессов и измерений <i>Владеет:</i> – навыками реализации виртуальных приборов и алгоритмов в NI LabView; – навыками грамотного применения структур NI LabView; – навыками навигации и проверки собственных моделей в среде NI LabView.	Оценка за контрольную работу №4 (7 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»
Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Аналитическая химия»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024 г.

Программа составлена доцентом кафедры Сколтеха к.х.н. Токаревым С.Д.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направления подготовки **04.03.01 Химия**, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестров.

Дисциплина «**Аналитическая химия**» относится к обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области неорганической химии, имеют начальные знания по физике, органической и физической химии.

Цель дисциплины – формирование базовых знаний о видах и способах химического анализа, методах определения состава веществ, наиболее широко применяемых в промышленности и исследовательской работе, а также компетенций, необходимых химикам всех специальностей для решения конкретных задач химического анализа.

Задачи дисциплины

- изучение теоретических основ методов анализа, применяемых в промышленности и исследовательской работе;
- ознакомление с методами и приборным оформлением различных стадий анализа: пробоподготовки, концентрирования, разделения и идентификации образцов;
- изучение метрологических характеристик методов анализа.

Дисциплина «**Аналитическая химия**» преподается в 3 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины «направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;
Безопасность жизнедеятельности	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций помощь, описывает способы участия в восстановительных мероприятиях

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.
	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные термины, понятия и методы качественного и количественного анализа;
- теоретические основы методов анализа, применяемых в химии;
- приборное и материальное оформление методов анализа, применяемых в химии

Уметь:

- оценивать возможности методов, обосновано выбирать соответствующий метод для решения конкретной задачи;
- математически обрабатывать результаты исследования;

Владеть:

- методологией подбора методов анализа конкретного объекта, методикой его проведения и интерпретации результатов

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3,6	128	97,2
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	1,8	64	48,6
Самостоятельная работа	1,4	52	37,8
Контактная самостоятельная работа	1,4	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		52	37,8
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1,4	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	Экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лек- ции	Прак зан.	Сам. работа
1	Раздел 1. Аналитическая химия, ее задачи и методы.	7	2	2	3
2	Раздел 2. Виды химического равновесия. Титриметрические методы	28	8	8	12
и	Основные типы реакций и процессов в аналитической химии.	7	2	2	3
2.1					
2.2	Кислотно-основное равновесие и титрование.	7	2	2	3
2.3	Окислительно-восстановительное титрование.	7	2	2	3
2.4	Комплексонометрическое титрование	7	2	2	3
3	Раздел 3. Равновесие в гетерогенных системах. Гравиметрия. Методы разделения и концентрирования	21	6	6	9
3.1	Равновесие в системе осадок-раствор	7	2	2	3
3.2	Методы разделения и концентрирования	7	2	2	3
3.3	Пробоотбор и пробоподготовка	7	2	2	3
4	Раздел 4. Метрологические основы химического анализа	7	2	2	3
5	Раздел 5. Хроматографические методы анализа	28	8	10	12
5.1	Теоретические основы хроматографических методов.	7	2	4	3
5.2	Газовая хроматография	7	2	2	3
5.3	Жидкостная хроматография	7	2	2	3
5.4	Планарная хроматография, другие виды хроматографии	7	2	2	3
6	Раздел 6. Избранные приборные методы анализа и автоматизация аналитических определений	15	6	4	5
6.1	Атомно-эмиссионные, атомно-абсорбционные и другие приборные методы анализа.	9	4	2	3
6.3	Автоматический и автоматизированный анализ.	6	2	2	2
ИТОГО		108	32	32	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Аналитическая химия, ее задачи и методы.

Основные понятия и термины аналитической химии. Химический анализ. Виды и этапы химического анализа. Области применения Основные характеристики методов анализа. Место аналитической химии в системе химических наук. Области применения.

Раздел 2. Виды химического равновесия. Титриметрические методы

2.1 Основные типы реакций и процессов в аналитической химии.

Титриметрические методы анализа. Химическое равновесие в гомогенных и гетерогенных системах. Идеальные и реальные системы, электростатические и химические взаимодействия. Термодинамическая, концентрационная и условная константы равновесия. Теоретические основы титриметрического анализа; особенности и принципы построения кривых титрования.

2.2 Кисотно-основное равновесие и титрование.

Протолитическая теория кислот и оснований. Равновесие в системе: кислота - сопряженное основание - растворитель. Константы кислотности, основности, автопротолиза. Буферные растворы. Нивелирующий и дифференцирующий эффекты растворителя. Кисотно-основное титрование. Сущность метода. Построение кривой титрования. Факторы, влияющие на величину скачка кислотно-основного титрования; принцип действия и выбора кислотно-основных индикаторов; погрешности титрования. Применение кислотно-основного титрования в анализе.

2.3 Окислительно-восстановительное титрование.

Равновесие в окислительно-восстановительных системах. Уравнение Нернста, различные виды окислительно-восстановительного потенциала, определение направления окислительно-восстановительной реакции. Окислительно-восстановительное титрование. Скорость реакций в аналитической химии. Принципы построения кривых окислительно-восстановительного титрования, способы фиксации конечной точки титрования, погрешности титрования. Роль скорости в химических процессах. Автокатализ. Индуцированные и сопряженные реакции. Перманганатометрия; определение железа(II), марганца (II), оксалатов. Иодометрия и иодиметрия; система иод-иодид как окислитель или восстановитель. Дихроматометрия. Определение восстановителей.

2.4 Комплексонометрическое титрование

Комплексные соединения. Органические реагенты в аналитической химии. Реакции комплексообразования; признаки комплексных соединений; константы устойчивости; факторы, влияющие на устойчивость комплексов; органические реагенты; функционально-аналитические группы, их роль; влияние структуры органических реагентов на их свойства; важнейшие органические реагенты, применяемые в анализе. Неорганические и органические титранты в комплексометрии; использование аминополикарбоновых кислот в комплексометрии. Селективность титрования и способы ее повышения. Особенности и принципы построения кривых комплексонометрического титрования; принцип действия и критерии выбора металлоиндикаторов.

Раздел 3. Равновесие в гетерогенных системах. Гравиметрия. Методы разделения и концентрирования

3.1 Равновесие в системе осадок-раствор.

Образование осадков. Количественные характеристики гетерогенного равновесия; условия осаждения и растворения осадков (кристаллических и аморфных); коллоидные системы, образование и свойства коллоидных частиц. Гравиметрический анализ. Основы метода гравиметрии; расчёты в гравиметрии; требования к осаждаемой и гравиметрической формам. Виды и причины загрязнения осадков, способы их устранения; использование реакций осаждения в химическом анализе

3.2 Методы разделения и концентрирования.

Теоретические основы методов разделения и концентрирования; основные количественные характеристики; применение в химическом анализе. Экстракция. Теоретические основы, закон распределения; классификация экстракционных процессов; скорость экстракции; типы экстракционных систем; применение в химическом анализе.

3.3 Пробоотбор и пробоподготовка.

Представительность пробы; факторы, обуславливающие размер и способ отбора представительной пробы; отбор проб гомогенного и гетерогенного состава, различной природы: твердых, жидких, газообразных. Способы подготовки проб к анализу: разложение проб методами растворения, сплавления, спекания, термического разложения. Примеры использования.

Раздел 4. Метрологические основы химического анализа

Статистическая обработка результатов количественного анализа. Аналитический сигнал. Способы выражения зависимости аналитический сигнал-содержание. Способы

определения концентрации веществ. Правильность и воспроизводимость. Классификация погрешностей. Статистическая обработка результатов измерений. Закон нормального распределения.

Раздел 5. Хроматографические методы анализа

5.1 Теоретические основы хроматографических методов.

Классификация методов. Определение хроматографии; понятие о подвижной и неподвижной фазах; классификация методов по агрегатному состоянию фаз, по механизму разделения, по технике выполнения; способы получения хроматограмм; основное уравнение хроматографии.

5.2 Газовая хроматография.

Газо-адсорбционная (газо-твердофазная) и газо-жидкостная хроматография; сорбенты и носители, требования к ним; механизм разделения; схема газового хроматографа; колонки; основные типы детекторов, их чувствительность и селективность.

5.3 Жидкостная хроматография.

Нормально-фазовый и обращеннофазовый варианты; особенности ВЭЖХ; полярные и неполярные неподвижные фазы и принципы их выбора; модифицированные силикагели как сорбенты; подвижные фазы и принципы их выбора.

5.4 Планарная хроматография, другие виды хроматографии.

Общие принципы разделения. Способы получения плоскостных хроматограмм. Бумажная хроматография. Механизмы разделения. Подвижные фазы. Преимущества и недостатки. Тонкослойная хроматография. Механизмы разделения. Сорбенты и подвижные фазы. Области применения. Особенности ионообменной хроматографии; ионообменное равновесие; константа ионного обмена; коэффициент селективности; сорбционные ряды; выбор оптимальных условий ионообменного разделения веществ. Общее уравнение, описывающее процесс гель-хроматографии; сорбенты; общий, внешний и внутренний объемы колонки. Выражение коэффициента распределения и константы доступности. Возможности гель-хроматографии. Примеры практического использования.

Раздел 6. Избранные приборные методы анализа и автоматизация аналитических определений

6.1 Атомно-эмиссионные, атомно-абсорбционные и другие приборные методы анализа.

Спектры атомов, основные и возбужденные состояния атомов, принципиальная схема атомноэмиссионного спектрометра; источники атомизации и возбуждения (атомизаторы); их основные характеристики. Физические и химические процессы в атомизаторах. Качественный и количественный анализ методом атомно-эмиссионной спектрометрии. Метрологические характеристики и аналитические возможности. Принципиальная схема атомноабсорбционного спектрометра; атомизаторы (пламенные и непламенные); источники излучения, их характеристики. Возможности, достоинства и недостатки метода, его сравнение с атомноэмиссионным методом. Метрологические характеристики. Обзор других приборных методов анализа, цели и особенности их применения. Введение в спектроскопические методы анализа. Метод молекулярной абсорбционной спектроскопии. Люминесцентные методы. Методы рентгеновской спектроскопии. Масс-спектрометрия. Электрохимические методы

6.2 Автоматический и автоматизированный анализ.

Цели и задачи; проточные методы анализа: непрерывный проточный анализ и проточно-инжекционный анализ; обзор приборных методов анализа; анализ промышленных, природных и биологических объектов.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6
	Знать:						
1	– основные термины, понятия и методы качественного и количественного анализа;	+	+	+	+	+	
2	– теоретические основы методов анализа, применяемых в химии	+	+	+	+	+	
3	– приборное и материальное оформление методов анализа, применяемых в химии		+	+		+	+
	Уметь:						
4	– оценивать возможности методов, обосновано выбирать соответствующий метод для решения конкретной задачи;		+	+		+	+
5	– математически обрабатывать результаты исследования		+	+	+	+	+
	Владеть:						
6	– методологией подбора методов анализа конкретного объекта, методикой его проведения и интерпретации результатов		+	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>Универсальные и Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>							
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК					
7	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;	+	+	+	+	+
8	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций помощь, описывает способы участия в восстановительных мероприятиях	+	+	+	+	+
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК					

9	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.	+	+	+	+	+	+
10	ОПК-2 Способен про-водить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования	+	+	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Аналитическая химия, ее задачи и методы.	2
2	2	Основные типы реакций и процессов в аналитической химии.	2
3	2	Кислотно-основное равновесие и титрование.	2
4	2	Окислительно-восстановительное титрование.	2
5	2	Комплексонометрическое титрование	2
6	3	Равновесие в системе осадок-раствор	2
7	3	Методы разделения и концентрирования	2
8	3	Пробоотбор и пробоподготовка	2
9	4	Метрологические основы химического анализа	2
10	5	Теоретические основы хроматографических методов.	4
11	5	Газовая хроматография	2
12	5	Жидкостная хроматография	2
13	5	Планарная хроматография, другие виды хроматографии	2
14	6	Атомно-эмиссионные, атомно-абсорбционные и другие приборные методы анализа.	2
15	6	Автоматический и автоматизированный анализ.	2

6.2 Лабораторные занятия

. Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «*Аналитическая химия*», а также дает знания о классических и современных методах аналитической химии.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 20 баллов (максимально по 2 балла за каждую работу).

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	1	Качественный анализ. Идентификация смеси катионов в растворе и сухой соли	4
2	2	Кислотно-основное титрование. Определение содержания гидроксида и карбоната натрия в растворе.	4
3	2	Окислительно-восстановительное титрование. Определение содержания Fe^{2+} в растворе методами перманганато- и хроматометрии (по выбору преподавателя). или определение содержания Cu^{2+} йодометрическим методом.	4
4	2	Комплексонометрическое титрование. Определение содержания ионов металлов (по выбору преподавателя) в растворе.	4

5	5	Газовая хроматография. Определение содержания микропримесей в этиловом спирте методом газовой хроматографии.	4
6	5	Высокоэффективная жидкостная хроматография (задача по выбору преподавателя).	6
7	5	Ионообменная хроматография. Определение содержания Cu^{2+} и Fe^{3+} в растворе после их разделения методом ионообменной хроматографии.	6
8	6	Оптические методы анализа. Спектрофотометрическое определение содержания La^{3+} в растворе по реакции с арсеназо-3.	6
9	6	Электрохимические методы анализа. Ионметрия. Определение содержания фторид-ионов в растворе методом стандартных добавок.	6
10	6	Электрохимические методы анализа. Потенциометрическое титрование. Определение общей щелочности воды.	6

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче экзамена (3 семестр) и лабораторного практикума (3 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 20 балла) и итогового контроля в форме *Экзамена*.

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая программа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы (Контрольная работа №1 по разделам 1-3, Контрольная работа №2 по разделам 4-6). Максимальная

оценка за контрольные работы 1 и 2 (3семестр) составляет 40 баллов, по 20 баллов за каждую работу.

Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 балла за вопрос.

Вопрос 1.1.

Рассчитайте общую концентрацию оксалата натрия, обеспечивающую равновесную концентрацию оксалат-иона $2 \cdot 10^{-3}$ М при pH 3,00. Для $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$: $K_{a,1} = 5,6 \cdot 10^{-2}$, $K_{a,2} = 5,4 \cdot 10^{-5}$

Вопрос 1.2.

На титрование раствора NaOH, содержащего 4% Na_2CO_3 , в присутствии метилового оранжевого (pT=4,0) израсходовали 25,00 мл стандартного раствора HCl. Какой объем титранта пойдет на титрование этого же раствора NaOH в присутствии фенолфталеина (pT=9,0)? Для H_2CO_3 : $K_{a,1} = 4,5 \cdot 10^{-7}$, $K_{a,2} = 4,8 \cdot 10^{-11}$.

Вопрос 1.3.

Рассчитайте константу равновесия реакции между ионами IO_3^- и I^- в растворе, в котором потенциал водородного электрода равен -0.30 В. При каком значении pH реакция не происходит ($K \leq 1$)? $E_{\text{IO}_3^-/\text{I}_2}^0 = 1.17$ В, $E_{\text{I}_2/2\text{I}^-}^0 = 0.54$ В

Вопрос 1.4

В растворе нужно определить содержание железа (III) и хрома (III). Как это сделать, имея в распоряжении стандартный раствор перманганата калия, серебряный и цинковый редукторы? $E_{\text{AgCl}/\text{Ag}}^0 = 0.22$ В, $E_{\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}}^0 = -0.76$ В, $E_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}^0 = 0.77$ В, $E_{\text{Cr}^{3+}/\text{Cr}^{2+}}^0 = -0.41$ В.

Вопрос 1.5.

Ионы серебра, содержащиеся в 25,00 мл пробы, превратили в цианидный комплекс, добавив избыток раствора $\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$. На титрование выделившихся ионов никеля израсходовали 43,70 мл 0,0240 М раствора ЭДТА. Напишите уравнения реакций и рассчитайте концентрацию (г/л) серебра в растворе пробы. Мол. масса Ag – 107,86

Вопрос 1.6.

В 100 мл 0,01 М HNO_3 растворяется $4,00 \cdot 10^{-5}$ г Hg_2Cl_2 . Рассчитайте концентрацию ртути г/л в насыщенном растворе Hg_2Cl_2 в присутствии 0,001 М HCl. Мол. массы: Hg_2Cl_2 - 472,09; Hg - 200,59

Вопрос 1.7.

К раствору, содержащему 0,01753г NaCl в литре, прибавили равный объем раствора Ag_2SO_4 , полученного десятикратным разбавлением насыщенного раствора. Выпадет ли осадок? Ионной силой пренебречь. $K_s^0 = \{\text{Ag}_2\text{SO}_4\} = 1,46 \cdot 10^{-5}$; $K_s^0 \{\text{AgCl}\} = 1,8 \cdot 10^{-10}$; мол. масса NaCl – 58,44.

Вопрос 1.8.

Изучено распределение кислоты НА между равными объемами воды и нитробензола. Константа распределения кислоты равна 10^3 , а коэффициент распределения при pH 6 – 10^2 . Рассчитайте константу диссоциации кислоты ($K_{a,\text{НА}}$). Нарисуйте кривую распределения кислоты и укажите интервал pH, в котором константа распределения равна коэффициенту распределения.

Вопрос 1.9.

Почему растворимость свежесосажденных и постоявших в растворах осадков различается?

Вопрос 1.10.

От каких факторов зависит степень извлечения вещества при экстракции?

Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 4 балла за вопрос.

Вопрос 2.1.

На хроматограмме получены пики при 0,84 мин (неудерживаемый компонент А), при 10,60 мин (компонент В) и 11,08 мин (компонент С). Ширина пиков В и С соответствует 0,56 и 0,59 мин соответственно. Длина колонки - 28,3 см, объем стационарной фазы - 12,3 мл, подвижной фазы - 17,6 мл. Рассчитайте: а) число теоретических тарелок колонки; б) высоту, эквивалентную теоретической тарелке, и укажите, что характеризует эта величина; в) коэффициент удерживания для компонентов В и С; г) коэффициенты распределения компонентов В и С; д) коэффициент селективности и разрешение пиков компонентов В и С. Нарисуйте хроматограмму.

Вопрос 2.2.

При разделении на хроматографической колонке с объемом неподвижной фазы 1,5 мл и объемом удерживания неудерживаемого компонента 2,5 мл, соединения А и В имеют коэффициенты распределения 5,0 и 15,0 соответственно. Эффективность колонки - 20 теоретических тарелок. Рассчитайте, будет ли полным разделение веществ А и В. Какова должна быть эффективность колонки, чтобы получить 6 σ -разделение компонентов А и В?

Вопрос 2.3.

Стандартные отклонения хроматографического пика, связанные с некоторыми факторами размывания, составляют 0,0041; 0,0011; 0,0091 и 0,0470 см. Вычислите: а) стандартное отклонение ширины пика; б) эффективность колонки (Н, мкм) длиной 15 см; в) число 13 теоретических тарелок, необходимое для 4 σ -разделения двух веществ, если коэффициент селективности равен 1,03.

Вопрос 2.4.

Определите удерживаемый объем н-пентанола, если при 77°C и скорости потока газ-носителя 90 мл/мин на сорбенте Chromaton N AW DMCS, покрытом Carbowax 1500, получены следующие времена удерживания спиртов: метанол - 72,3 с; этанол - 126 с; бутанол - 509 с. Пик неудерживаемого компонента появляется на хроматограмме через 30 с.

Вопрос 2.5.

Нарисуйте схему потокораспределительной системы для проточно-инжекционного анализа. В чем его сущность?

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен).

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов

1. Аналитическая химия. Виды анализа. Стадии химического анализа. Основные характеристики методов анализа. Абсолютные и относительные методы. Выбор метода анализа. Способы повышения чувствительности и избирательности методов. Автоматизация анализа

2. Метрологические основы химического анализа. Аналитический сигнал. Способы выражения зависимости аналитический сигнал/содержание. Соотношение аналитический сигнал/шум. Контрольный опыт. Способы определения концентрации веществ. Правильность и воспроизводимость. Классификация погрешностей. Систематические погрешности. Проверка правильности анализа. Стандартные образцы. Случайные погрешности. Статистическая обработка результатов измерений. Закон нормального распределения. t-Распределение. Сравнение дисперсий и средних двух методов анализа.

3. Пробоотбор и пробоподготовка. Представительность пробы в химическом анализе. Отбор средней пробы. Подготовка пробы к анализу.
4. Основные типы реакций и процессов в аналитической химии. Основные типы химических реакций, используемых в аналитической химии. Химическое равновесие в гомогенных и гетерогенных системах. Термодинамическая, концентрационная и условная константы равновесия.
5. Кислотно-основные реакции. Протолитическая теория кислот и оснований. Равновесие в системе: кислота - сопряженное основание - растворитель. Константы кислотности, основности, автопротолиза. Нивелирующий и дифференцирующий эффекты растворителя.
6. Реакции комплексообразования. Типы и свойства комплексных соединений, используемых в аналитической химии. Количественная характеристика реакций комплексообразования: константа устойчивости. Ступенчатое комплексообразование. Использование комплексных соединений для разделения, концентрирования, маскирования, обнаружения, определения элементов.
7. Окислительно-восстановительные реакции в аналитической химии. Обратимые и необратимые окислительно-восстановительные системы и их потенциалы. Уравнение Нернста. Стандартный и реальный окислительно-восстановительные потенциалы. Направление окислительно-восстановительных реакций.
8. Реакции осаждения в аналитической химии. Константы равновесия реакций осаждения. Растворимость осадков. Факторы, влияющие на растворимость. Образование осадков. Кристаллические и аморфные осадки, условия осаждения. Причины загрязнения осадков: совместное осаждение, соосаждение, последующее осаждение. Виды соосаждения. Приемы, способствующие получению чистых осадков.
9. Методы разделения и концентрирования. Основы экстракции как метода разделения и концентрирования. Константа распределения, коэффициент распределения. Константа экстракции. Фактор разделения. Условия экстракции неорганических и органических соединений. Практическое применение экстракции. Методы разделения элементов, основанные на осаждении неорганическими и органическими реагентами. Использование соосаждения для концентрирования микрокомпонентов. Неорганические и органические коллекторы.
10. Хроматографические методы. Принципы и классификация. Хроматограммы и способы их получения. Основные теоретические положения и характеристики методов. Газовая хроматография. Требования к стационарным и подвижным фазам. Примеры практического применения. Жидкостная хроматография. Требования к стационарным и подвижным фазам. Ионная хроматография. Бумажная и тонкослойная хроматография. Принципы методов. Примеры практического применения.
11. Гравиметрические методы. Сущность. Осаждаемая и гравиметрическая формы. Примеры практического применения.
12. Кислотно-основное титрование. Кривые титрования. Кислотноосновные индикаторы. Погрешности метода кислотно-основного титрования. Титрование смесей кислот и оснований. Титрование в неводных средах.
13. Комплексонометрическое титрование. Преимущества аминополикарбоновых кислот перед другими органическими титрантами. Металлохромные индикаторы, требования к ним. Способы титрования (прямой, обратный, вытеснительный, косвенный).

Практическое применение комплексонометрического титрования (определение ионов кальция, магния, железа).

14. Окислительно-восстановительное титрование. Факторы, влияющие на величину скачка потенциала, способы обнаружения конечной точки титрования. Перманганатометрическое, бихроматометрическое, иодометрическое титрование. Первичные и вторичные стандарты. Индикаторы. Примеры практического применения.

15. Атомно-эмиссионный метод. Источники возбуждения и атомизации. Физико-химические процессы в плазме. Качественный и количественный анализ. Области применения, метрологические характеристики методов.

16. Атомно-абсорбционный метод. Основные принципы. Использование пламен для атомизации вещества. Физико-химические процессы в пламенах. Непламенные методы атомизации. Селективность и чувствительность метода. Примеры практического применения.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (3 семестр).

Экзамен по дисциплине «*Аналитическая химия*» проводится в 3 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-6 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

<i>«Утверждаю»</i> Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии» Аналитическая химия
Билет № 1 1. Метрологические основы химического анализа. Аналитический сигнал. Способы выражения зависимости аналитический сигнал/содержание. Соотношение аналитический сигнал/шум. Контрольный опыт. Способы определения концентрации веществ. Правильность и воспроизводимость. Классификация погрешностей. Систематические погрешности. Проверка правильности анализа. Стандартные образцы. Случайные погрешности. Статистическая обработка результатов измерений. Закон нормального распределения. t-Распределение. Сравнение дисперсий и средних двух методов анализа. 2. Атомно-эмиссионный метод. Источники возбуждения и атомизации. Физико-химические процессы в плазме. Качественный и количественный анализ. Области применения, метрологические характеристики методов.	

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Основы аналитической химии. В двух книгах /под ред. Ю.А. Золотова/. М.: Высш. шк., 2012.
2. Аналитическая химия. Химические методы анализа. Учебник для вузов/ Под ред. О.М. Петрухина,- 2-ое изд., стереотипное, исправленное, -М.: ООО Путь, ООО ИД АЛЬЯНС, 2017.
3. Основы аналитической химии. Задачи и упражнения /под ред. Ю.А. Золотова/. М.: Высш. шк., 2020.
4. Задания по аналитической химии, уч. пособие / Е.В. Крылова, 2-ое изд. РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2012. – 112 с.
5. Задания по аналитической химии, уч. пособие / Е.В. Крылова, Е.Г. Шалимова 3-ье изд. РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2016. – 152 с.

Б. Дополнительная литература

1. Кузнецов В.В. Аналитические реакции для идентификации ионов элементов в растворах. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2010. -163 с.
2. Кунце У., Шведт Г. Основы качественного и количественного анализа. М.: Мир, 1997. 424 с
3. Ю.Ю. Лурье. Справочник по аналитической химии. Справ. изд. – М.:Химия, 1989. – 448 с.
4. Кузнецов В.В. Применение органических аналитических реагентов в анализе неорганических веществ. Учебн. пособие. – М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1972. – 145 с.
5. Лайтинен Г.А., Харрис В.Е. Химический анализ. М.: Химия, 1979. 624 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://www.rsl.ru> - Российская Государственная Библиотека
- <http://www.gpntb.ru> - Государственная публичная научно-техническая библиотека России
- <http://lib.msu.su> - Научная библиотека Московского государственного университета
- <http://window.edu.ru> - Полнотекстовая библиотека учебных и учебно-методических материалов
- <http://abc-chemistry.org/ru/> - ABC-Chemistry : Бесплатная научная химическая информация
- <http://www.fips.ru/cdfi/fips2009.dll> - Сайт ФИПС. Информация о патентах
- <http://findebookee.com/> - поисковая система по книгам
- <http://elibrary.ru> - Научная электронная библиотека
- <http://lcweb.loc.go> - Библиотека Конгресса США

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 200);
- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 300);

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Аналитическая химия*» проводятся в форме лекций, практических занятий, лабораторного практикума и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная средствами демонстрации и учебной мебелью.

Оборудованная лаборатория: аквадистилляторы ДЭ-10 ЭМО; аквадистиллятор АЭ-25 ООО «Ливам ПФ», рН-метры с автоматической и ручной компенсацией температуры ИПЛ 301, рН-метр-милливольтметр рН-420; стандарт-титр рН метрия общая ООО «ХИМТИТРЫ», лабораторные электронные весы: весы Citizen Scale CY-223, весы Citizen Scale CY-124C, весы электронные аналитические MB-210A, весы аналитические AND HR-100AG, весы OHAUS V11P15, весы Citizen Scale CY-1202, весы лабораторные ВЛТЭ-

510С, весы порционные AND HT-500 (500г, 0,1г, внешняя калибровка), весы Citizen Scale CY-224; колба нагреватель КН-500 Stegler, мешалка магнитная STEGLER HS с подогревом, спектрофотометр однолучевой СФ-104 с разделением светового потока сканирующий, спектрофотометр однолучевой СФ-102 с разделением светового потока иономер И-510, шкафы сушильные ШС-40-ПЗ; шкаф сушильный (тип 2) ШС-40-02 СПУ мод. 2204, шкаф сушильный (тип 1) ШС-20-02 СПУ мод. 2202, шкаф сушильный (тип 3) ШС-80-02 СПУ мод. 2208 жидкостной циркуляционный термостат ВТ10-1 (+20...+100 °С), термостат жидкостной LOIP LT 124а; ВТ3-1 (+20...+100 °С); ВТ5-1 (+20...+100 °С) жидкостной циркуляционный термостат, 5 л.; электрическая плита IRIT IR-8004 IRIT; столик подъемный лабораторный металлический (тип 1) НВ-150 Stegler, сушилка для пробирок (тип 1) 0362А (полипропилен) Stegler, сушилка для пробирок (тип 2) 0362В (полипропилен) Stegler.

Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Аналитическая химия, ее задачи и методы.	<i>Знает:</i> – основные термины и понятия аналитической химии, виды и этапы анализа; – место аналитической химии в системе химических наук и промышленности;	Оценка за контрольную работу №1 (3 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (3 семестр)
Раздел 2. Виды химического равновесия. Титриметрические методы	<i>Знает:</i> – типы химических реакций в растворах и устанавливаемые равновесия, используемые в аналитической химии – теоретические основы различных методов титрования <i>Умеет:</i> – применять различные методы титрования, строить кривые титрования и рассчитывать концентрации <i>Владеет:</i> – Современными представлениями о титриметрических методах	Оценка за контрольную работу №1 (3 семестр) Оценка за лабораторный практикум (3 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (3 семестр)
Раздел 3. Равновесие в гетерогенных системах. Гравиметрия. Методы разделения и концентрирования	<i>Знает:</i> – основы метода и расчеты в гравиметрии – теоретические основы методов разделения и концентрации – способы отбора представительной пробы <i>Умеет:</i> – рассчитывать количественные характеристики гетерогенного равновесия – обосновывать подбор экстракционных систем <i>Владеет:</i> – Современными представлениями о методах разделения, концентрирования и гравиметрии	Оценка за контрольную работу №1 (3 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (3 семестр)

Раздел 4. Метрологические основы химического анализа	<i>Знает:</i> – основные термины, понятия и законы метрологии применительно к химическому анализу – основы обработки результатов количественного анализа	Оценка за контрольную работу №2 (3 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (3 семестр)
Раздел 5. Хроматографические методы анализа	<i>Знает:</i> – основы метода и расчеты в хроматографии – виды хроматографии и их приборное оформление <i>Умеет:</i> – обосновывать подбор сорбентов, носителей и детекторов <i>Владеет:</i> – Современными представлениями о хроматографических методах анализа	Оценка за контрольную работу №2 (3 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (3 семестр)
Раздел 6. Избранные приборные методы анализа и автоматизация аналитических определений	<i>Знает:</i> – сферы применений приборных методов анализа – принцип действия, достоинства и недостатки автоматизированных методов анализа – методы анализа промышленных, природных, органических и биологических объектов	Оценка за контрольную работу №2 (3 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (3 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

« _____ »

основной образовательной программы

« _____ »

код и наименование направления подготовки (специальности)

« _____ »

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Гетероциклические структуры в материаловедении»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена зав.кафедрой Сколтеха д.х.н. Травнем В.Ф.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Гетероциклические структуры в материаловедении»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области органической химии.

Цель дисциплины – создание основы для понимания строения и превращений химии гетероциклических соединений с учетом того, что типы реакций и факторы, влияющие на их протекание, вытекают из самой органической химии, и поэтому едины для органической химии и химии гетероциклических соединений.

Задачи дисциплины – обучающийся должен получить современные представления

- о типах гетероатомов и гетероароматических структур,
- о химических свойствах и методах получения различных типов гетероциклических систем,
- об электронном и пространственном строении гетероциклических соединений.

Дисциплина **«Гетероциклические структуры в материаловедении»** преподается в 5 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Системное и критическое мышление	УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие; УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи; УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов;
Разработка и реализация проектов	УК-2. Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений	УК-2.1. Определяет круг задач в рамках поставленной цели, определяет связи между ними УК-2.2. Предлагает способы решения поставленных задач и ожидаемые результаты; оценивает предложенные способы с точки зрения соответствия цели проекта УК-2.5. Представляет результаты проекта, предлагает возможности их использования и/или совершенствования

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н) (уровень квалификации – 6) Корректировка и разработка методик комплексного анализа структуры и свойств наноструктурированных композиционных материалов</i>

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- типы реакционной способности гетероцикла исходя из его структурной формулы;
- основные термины и понятия химии гетероциклических соединений; современные тенденции химии гетероциклов, их применение;
- номенклатуру химии гетероциклических соединений.

Уметь:

- планировать синтез целевой структуры путем введения и модификации функций в различные положения гетероцикла (на основе изученных паттернов реакционной способности);
- планировать синтез целевой структуры на основе базовых принципов создания гетероциклического ядра путем циклизаций или рециклизаций;

Владеть:

- современными синтетическими методами применительно к химии гетероциклических соединений;

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Самостоятельная работа	1,2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,2	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43,6	32,7
Вид итогового контроля:	зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лек- ции	Прак. зан.	Сам. рабо- та
1.	Раздел 1. Общие представления	10	4	-	6
1.1	Общие представления о структуре, физико-химических свойствах и устойчивости гетероциклических соединений. Биологически значимые гетероциклы.	5	2	-	3
1.2	Взаимопревращения, специфика химических свойств, базовые подходы и методы синтеза насыщенных, частично и полностью сопряжённых гетероциклов. Раскрытие и замыкание циклов, реакции рециклизации (ANRORC)	5	2	-	3
2.	Раздел 2. Макроциклы.	74	24	20	30
2.1	Пятичленные гетеромоноциклы: один или два гетероатома	9	4	2	3
2.2	Пятичленные гетеромоноциклы: три и более гетероатомов	7	2	2	3
2.3	Бензоаннелированные пятичленные гетероциклы	7	2	2	3
2.4	Шестичленные гетеромоноциклы: один или два гетероатома	9	4	2	3
2.5	Шестичленные гетеромоноциклы: три и более гетероатомов	7	2	2	3
2.6	Бензоаннелированные шестичленные гетероциклы	7	2	2	3
2.7	Четырёх- и трёхчленные гетероциклы	7	2	2	3
2.8	Семичленные гетероциклы и циклы большего размера	7	2	2	3
2.9	Элементоорганические, металациклы и трёхмерные системы	7	2	2	3
2.10	Полигетероциклы	7	2	2	3
3.	Раздел 3. Ретросинтетический анализ	24	4	12	8
3.1	Ретросинтетический анализ линейно связанных гетероциклов	12	2	6	4
3.2	Ретросинтетический анализ полигетероциклов и гибридных систем	12	2	6	4
	ИТОГО	108	32	32	44
	Экзамен	-			
	ИТОГО	108			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Общие представления

1.1 Общие представления о структуре, физико-химических свойствах и устойчивости гетероциклических соединений. Биологически значимые гетероциклы.

Основные структурные типы. Полностью насыщенные гетероциклы. Азотсодержащие органические соединения природного происхождения (алкалоиды, пенициллины). Шестичленные и пятичленные ароматические гетероциклы. Порфирины, фталоцианины. Пурины, нуклеотиды и нуклеозиды. Систематическая и тривиальная номенклатура простейших гетероциклов.

Базовое квантово-химическое описание гетероциклов. Сравнение расчётных молекулярных орбиталей, распределения электронной плотности, индексов Виберга (квантово-химических порядков связи), NICS (независимых химических сдвигов) и экспериментальных длин и углов связей в ряду бензол-нитробензол-пиридин-пиррол с другими гетероциклами. Термохимические оценки. Энергии ароматизации и резонансные энергии. Экспериментальные критерии ароматичности. ЯМР-спектры гетероциклов и диамагнитный кольцевой ток, экранирование и дезэкранирование. Плоские большие гетероаннулены, подчиняющиеся правилу Хюккеля, и неплоские системы.

1.2 Взаимопревращения, специфика химических свойств, базовые подходы и методы синтеза насыщенных, частично и полностью сопряжённых гетероциклов. Раскрытие и замыкание циклов, реакции рециклизации (ANRORC)

Несопряжённые гетероциклы: основные конформации, угловое и торсионное напряжения в шестичленных и пятичленных циклах. Малые и большие циклы. Инверсия азота. Основные факторы, влияющие на возможность замыкания и размыкания цикла. Окислительная ароматизация и реакции циклоприсоединения.

Полностью сопряжённые гетероциклы: асимметричность и отклонения от планарности. Таутомеры, различия в их ароматичности и энергиях связей: 2- и 4-пиридоны и гидроксипиридины, amino- и гидроксизамещённые пятичленные гетероциклы. Прототропная таутомерия: 3-гидроксипиридины, пиразолы, имидазолы и триазолы. Влияние характера среды (растворителя) на положение равновесия. Замыкания ароматических циклов на примерах реакций циклизаций по Паалю-Кнорру, Ганчу, Торпу, Фридлендеру, палладий-катализируемый вариант циклизации по Хеку, [3+2] присоединения (азидов и 1,3-диполей, с алкинами и нитрилами), внутри- и межмолекулярные циклизации солей диазония, аза-перегруппировки Коупа и электроциклические реакции. Представление о классификации вариантов циклизаций.

Тетраэдрический механизм реакций нуклеофильного замещения в гетероциклах. Нуклеофильное гетероароматическое замещение гидрид-иона (присоединение нуклеофила с ароматизацией). ANRORC-реакции рециклизации (присоединение нуклеофила, раскрытие и замыкание нового цикла). Раскрытие ароматических циклов на примерах гидролиза комплекса пиридин-триоксид серы и высших свободных азинов. Дегградация С-металлированных пятичленных гетероциклов, разложение пентазолов, реакции ретро-циклоприсоединения фуросанов. Фотохимические реакции.

Раздел 2. Макроциклы.

2.1 Пятичленные гетеромоноциклы: один или два гетероатома

Природные источники простейших пятичленных гетероциклов. Сравнение устойчивости в ряду фуран-пиррол-тиофен, основные характеристики, особенности стабильности и химических свойств. Подходы к получению фуранов. Синтез 1,4-дикетонов и 1,4-диальдегидов и их дегидратация. Трансформация фуранов в пирролы и тиофены. Реакции альфа-галогенкарбонильных соединений с 1,3-дикетонами в присутствии и в отсутствие аминов (реакции Фейста-Бенари, Ганча).

Реакционная способность пятичленных гетероциклов с одним гетероатомом. Реакции электрофильного замещения: галогенирование, протонирование, нитрование.

Циклоприсоединение гетероциклов в качестве диеновой компоненты. S-Окисление тιοфена пероксидами.

Пиразолы и имидазолы: основные характеристики, особенности стабильности и химических свойств в сравнении с пирролом. Менее устойчивые оксазолы и тиазолы. Синтез пиразолов из гидразинов и 1,3-бифункциональных реагентов (ацетилацетона, ацетоуксусного эфира, малононитрила и ортомуравьиного эфира). Синтез имидазолов. Реакции [3+2] циклоприсоединения в синтезе пятичленных гетероциклов. Химические свойства. Ацилирование. Депротонирование. «Танец» (миграция) галогенов. N-гетероциклические карбены. Моно- и полиалкилирование пиррола, пиразола и имидазола.

2.2 Пятичленные гетеромоноциклы: три и более гетероатомов

Стабильность и свойства 1,2,4- и 1,2,3-триазолов. Синтез 1,2,4-триазолов в сравнении с синтезом простейших азолов. Получение 1,2,3-триазолов по реакциям циклоприсоединения (жесткий термический и мягкий каталитический варианты). Менее стабильные оксадиазолы: синтез дегидратацией диацилгидразидов. Легкость раскрытия цикла окса- и тиадиазолов. Синтез тетразолов и пентазолов из азид-аниона и нитрилов либо солей диазония. Некоторые синтетические применения триазолов и тетразолов, термические, фотохимические и катализируемые реакции разложения, тетразолы как защитные группы.

2.3 Бензоаннелированные пятичленные гетероциклы

Сравнение свойств и методов синтеза бензо[b]фурана, бензо[b]пиррола (индола) и бензо[b]тιοфена со свойствами и методами синтеза моноциклических гетероциклов. Циклизация арилгидразинов с карбонильными соединениями (Фишера), циклизация альфа-(ариламино)кетонов (Бишлера), реакция оксалатов с *орто*-нитротолуолами (Рейссерта), циклизация N-ацил-*орто*-толуидина под действием оснований (Маделунга). Реакции индолов и их аналогов с электрофилами. Галогенирование, нитрование, окисление. Циклизации функционализированных индолов, современное состояние исследований.

Особенности подходов к малоустойчивым бензо[c]пирролу (изоиндолу) и его аналогам. Реакции циклоприсоединения бензо[c]-аннелированных гетероциклов в качестве диеновой компоненты. Индолизин. Бензимидазол, индазол (бензопиразол) и бензотриазол: методы получения и синтетическое применение.

2.4 Шестичленные гетеромоноциклы: один или два гетероатома

Пиридин: сравнение с бензолом и пирролом, важнейшие особенности. Синтез пиридинов конденсацией 1,3-дикарбонильных соединений с альдегидами или кетонами и аминами (Ганча), с альфа-цианоацетамидом (Гуареши). Пираны и пираноны. Синтез пиридинов из солей пирилия и аминов (пиридиний-пирилевый метод Катрицкого), конденсацией алкенилкетонов и альфа-галогенкетонов (Крёнке). Синтез пиридинов и пиридазинов циклоприсоединением диенофилов с высшими азинами (1,2,4-триазидами и 1,2,4,5-тетраазидами). Синтез пиримидинов из мочевины и ацетилацетона и его аналогов, по реакции тримеризации ацетонитрилов в присутствии основания, пиразинов из 1,2-дикарбонильных соединений и 1,2-диаминов, синтез пиридазинов циклоприсоединением азодикарбоксилатов.

Электрофильная атака пиридинов: N-протонирование, алкилирование, ацилирование, галогенирование, окисление, аминирование пиридинов и диазинов. Синтетическое применение продуктов реакций: циклоприсоединение илюдов пиридиния, практическое использование N-галоген- и N-ацилпиридинов. Электрофильное замещение при атоме углерода в активированных пиридинах и пиримидинах. Присоединение нуклеофилов к пиридину и его N-оксидам: нуклеофильное замещение галогена, трансформации пиридонов в галогенпиридины под действием галогенидов фосфора, C-аминирование незамещённого пиридина (реакция Чичибабина), атака алкиллитиевых реагентов. Сравнение реакционной способности 2,4- и 3-галогензамещённых пиридинов с галогенированными бензолами и нитробензолами. Восстановление цикла пиридина натрийборгидридом, щелочными металлами (по Бёрчу). Sr^3 -депротонирование алкильных групп 2,4-метилпиридинов. Различия в реакциях диазотирования 2,4- и 3-аминопиридинов. Генерирование дегидропиридинов, сравнение с бензинами. Базовые

представления о реакционной способности пиримидинов, пиазинов и пиридазинов (галогенирование, нуклеофильное замещение и присоединение).

2.5 Шестичленные гетеромоноциклы: три и более гетероатомов

Сравнение свойств 1,2,3-, 1,2,4- и 1,3,5-триазинов с пиридином и между собой. Синтез 1,2,4-триазинов из 1,2-дикарбонильных соединений и семикарбазидов или их аналогов. Синтез 1,3,5-триазинов кислотнo-катализируемой тримеризацией нитрилов. Синтез 1,2,4,5-тетразинов димеризацией гидразидов кислот, исходя из нитрилов и гидразина. Малоизученные моноциклические 1,2,3-триазины: внутримолекулярные циклизации азидов с нуклеофилами, триазены как аналоги 1,2,3-триазинов с открытой цепью. 1,2,3,4-Тетразины и их оксиды.

Присоединение нуклеофилов, восстановление, процессы циклоприсоединения 1,2,4-триазинов и 1,2,4,5-тетразинов в качестве диеновой компоненты. Реакции восстановительного сужения цикла. Мало изученное взаимодействие высших азинов с электрофилами.

2.6 Бензоаннелированные шестичленные гетероциклы

Сравнение хинолина и пиридина. Осмоление хинолина на свету. Сравнение изохинолина и хинолина. Синтез хинолинов из анилина и алкенилкетонoв (по Скраупу и Дёбнеру-Миллеру), *орто*-аминобензальдегидов или нитрилов и метиленактивных карбонильных соединений (по Фридлендеру). Синтез изохинолинов циклизацией бета-(фенил)этиламинонoв с производными кислот (по Бишлеру-Напиральскому), альдегидами (по Пикте-Шпенглеру). Современные подходы. Акридины. Хинолизины. Методы синтеза кумаринов и хромонов из монозамещённых или *орто*-дизамещённых производных бензола. Циклизация производных салицилового альдегида или *орто*-гидроксидоацетофенонов и малоновой кислоты, реакции резорцинов с ацетоуксусным эфиром, метилиденмалононитрилами или их аналогами. Синтез бензопиазинов из *орто*-фенилендиаминa и 1,2-дикетонoв, из *орто*-диацетилбензолoв и гидразина. Синтез бензо-1,2,3-триазинов внутримолекулярным диазотированием *орто*-аминобензамидов и гидразидов. Синтез бензопиримидинов конденсацией *орто*-аминобензонитрилов с производными карбоновых кислот. Особенности синтетических подходов к получению бензо[1,2,4]триазинов.

Параллели между реакционной способностью хинолина и нафталина. Галогенирование, механизм реакции. Кинетически- (5,8-замещение) и термодинамически- (6-замещение) контролируемое сульфирование. Присоединение нуклеофилов, соединения Рейссерта. Действие нуклеофилов на кумарин, взаимодействие хромона с гидразином. Окислительное расщепление хинолинов.

2.7 Четырёх- и трёхчленные гетероциклы

Несопряжённые четырёх- и трёхчленные гетероциклы: основные конформации, угловое и торсионное напряжения. Методы синтеза: внутримолекулярное замыкание цикла, реакции термического и фотохимического [2+1], [2+2]-циклоприсоединения кетонoв и алкенoв (Патерно-Бюхи), сульфенов и алкенoв, эпексидирование, аминирование алкенoв, кетонoв и иминов. Синтез эписульфидов из эпексидов и тиоцианат-аниона. Раскрытие цикла действием нуклеофилов. Реакции экструзии - диоксида серы из тиран-1,1-диоксидов, синтез алкенoв и ацетиленoв по реакции Рамберга-Бэклунда (обработка альфа-галоген и альфа,альфа-дигалогенсульфонoв основаниями), закиси азота или гидразина из N-нитрозо или N-аминоазиридинов. Равновесия между 1,3-диполями и трёхчленными гетероциклами, применение в синтезе. Базовые сведения о малоустойчивых ненасыщенных малых гетероциклах.

2.8 Семичленные гетероциклы и циклы большего размера

Основные представления о циклах большего размера. Устойчивость, склонность к сужению цикла, параллели с карбоциклами. Методы синтеза азепинов: из *орто*-аминоацетофенонов и производных глицина, разложением азидобензола, облучением илидов N-аминопиридиния. Перегруппировка оксепинов в фенолы в присутствии кислоты (NIH-сдвиг). Полиеновый характер системы: реакции циклоприсоединения с азодикарбоновым эфиром, фотохимическое внутримолекулярное [2+2] циклоприсоединение.

2.9 Элементоорганические, металлоциклы и трёхмерные системы

Современные синтетические и структурные представления о наиболее изученных элементоорганических производных бензола, цикlopентадиена и циклопропена. Фосфолы, боролы, силолы. Реакции раскрытия и расширения цикла. Трёхмерные гетерофуллерены, карбораны, кластерные соединения кремния и фосфора: базовые методы синтеза и химические свойства.

2.10 Полигетероциклы.

Систематическая номенклатура полициклических гетероциклов. Основные факторы, влияющие на химические свойства. Принципы анализа реакционной способности: гетеробиициклы с атомом и без атома азота в месте сочленения двух циклов, системы 5-5, 5-6 и 6-6. Примеры реакций и методов синтеза. Гетероаннелированные стероиды, трёхмерные фуллерены и карбораны: методы синтеза и некоторые свойства.

Раздел 3 Ретросинтетический анализ

3.1 Ретросинтетический анализ линейно связанных гетероциклов

Рассмотрение современного состояния химии линейно связанных гетероциклов. Примеры реакций и избранных синтетических подходов. Синтез гетероциклических конъюгатов, олигомеров, супрамолекулярных ансамблей с использованием реакций сочетания и димеризации при катализе палладием по Стилле (оловоорганические соединения), Сузуки (борорганические соединения), Хеку (присоединение алкенов) и др., линейный синтез и замыкание макроциклических краун, тиа- и азкараун-эфиров, содержащих гетероциклические фрагменты, метатезис гетероциклов с раскрытием цикла и полимеризацией (ROMP).

3.2 Ретросинтетический анализ полигетероциклов и гибридных систем

Рассмотрение современного состояния проблем полигетероциклов и гибридных систем. Примеры реакций и рассмотрение избранных методов синтеза. Синтез исходя из ациклических предшественников (из одного либо нескольких линейных фрагментов), трансформациями гетероциклов с образованием новых циклов (трёх-, пяти-, шестичленных), аннелирование к другим циклам (производным бензола, пяти- и шестичленным гетероциклам, полиароматическим соединениям). Одновременное аннелирование с несколькими циклами. Мелем, мелон и графитоподобный нитрид углерода. Аза-, бора-, тиа-, окса-полиароматические соединения (хризены, перопилены и др.) и их анионы: синтез, некоторые особенности строения и химические свойства.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	– типы реакционной способности гетероцикла исходя из его структурной формулы	+		
2	– основные термины и понятия химии гетероциклических соединений	+		
	– современные тенденции химии гетероциклов, их применение		+	+
	– номенклатуру химии гетероциклических соединений	+	+	+
	Уметь:			
3	– планировать синтез целевой структуры путем введения и модификации функций в различные положения гетероцикла (на основе изученных паттернов реакционной способности)		+	
4	– планировать синтез целевой структуры на основе базовых принципов создания гетероциклического ядра путем циклизаций или рециклизаций.			+
	Владеть:			
5	– современными синтетическими методами применительно к химии гетероциклических соединений	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Универсальные и Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>				
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК		
6	УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие; УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи; УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов;		
7	УК-2. Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений	УК-2.1. Определяет круг задач в рамках поставленной цели, определяет связи между ними УК-2.2. Предлагает способы решения поставленных задач и ожидаемые результаты; оценивает предложенные способы с точки зрения соответствия цели проекта УК-2.5. Представляет результаты проекта, предлагает возможности их использования и/или совершенствования		
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК		

8	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	2	Пятичленные гетеромоноциклы: один или два гетероатома	2
2	2	Пятичленные гетеромоноциклы: три и более гетероатомов	2
3	2	Бензоаннелированные пятичленные гетероциклы	2
4	2	Шестичленные гетеромоноциклы: один или два гетероатома	2
5	2	Шестичленные гетеромоноциклы: три и более гетероатомов	2
6	2	Бензоаннелированные шестичленные гетероциклы	2
7	2	Четырёх- и трёхчленные гетероциклы	2
8	2	Семичленные гетероциклы и циклы большего размера (макроциклы)	2
9	2	Элементоорганические и металациклы, трёхмерные системы	2
10	2	Полигетероциклы	2
11	3	Ретросинтетический анализ линейно связанных гетероциклов	6
12	3	Ретросинтетический анализ полигетероциклов и гибридных систем	6

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине «*Гетероциклические структуры в материаловедении*» не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *зачёта с оценкой* (5 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов), и итогового контроля в форме *зачёта с оценкой* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (5 семестр) составляет 30 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 5 вопроса, по 6 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

Сравните реакционную способность в реакциях Дильса-Альдера пиррола, пиразола, 1,2,4-триазола, пиридина, пиридазина, 1,2,4-триазина. В качестве какой компоненты (диен или диенофил) могут выступать перечисленные гетероциклы?

Вопрос 1.2.

Напишите механизм и продукт реакции пиррола с хлороформом в щелочной среде (первая стадия реакции - [1+2] циклоприсоединение карбена).

Вопрос 1.3.

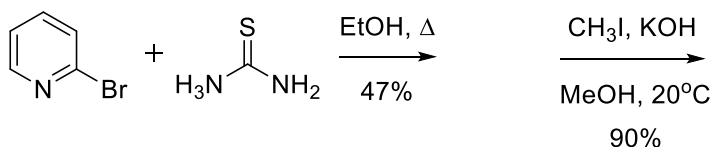
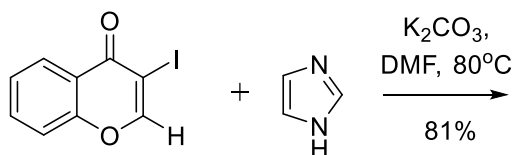
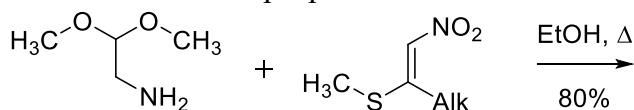
Синтезируйте несколько производных 1,2,4-триазола из цианамиды ($\text{NH}_2\text{-CN}$).

Вопрос 1.4.

Бензо[1,2,4]триазин был впервые получен из *орто*-нитроанилина. Предложите последовательность стадий синтеза.

Вопрос 1.5.

Закончите схемы превращений:



Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит _ вопроса, по _ баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

Синтезируйте несколько производных дитиена из сероуглерода и моно-альфа-замещенных производных уксусной кислоты.

Вопрос 2.2.

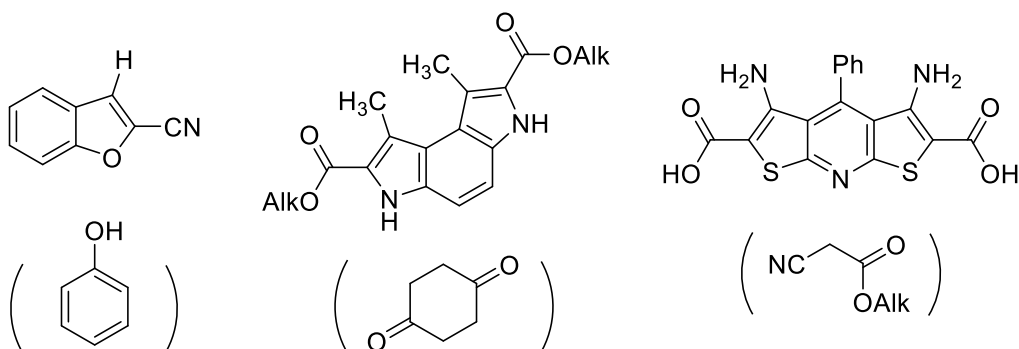
Получите тертиофен (4 линейно связанных цикла) из тиофена с использованием палладий-катализируемых реакций сочетания.

Вопрос 2.3.

Синтезируйте хиназолин (бензопиримидин) из антраниловой кислоты. Учтите, что аминогруппа более сильный нуклеофил, чем карбоксильная. Модифицируйте предложенный метод так, чтобы вводить произвольные алкильные, арильные и гетарильные заместители в положение 2 и гетероатомные-замещённые (OR, NR₂, SR, R = алкил, арил или гетарил) в положение 4 цикла.

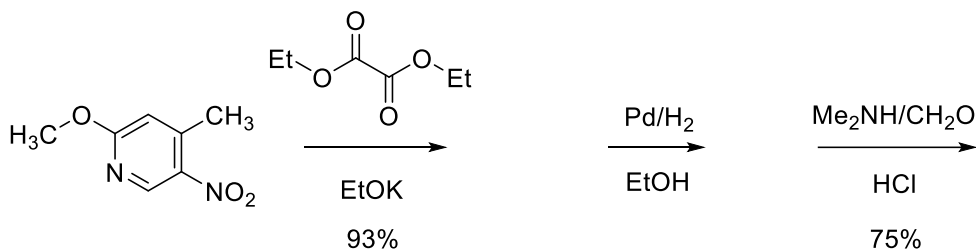
Вопрос 2.4.

Предложите методы синтеза следующих гетероциклов из доступных исходных соединений (даны в скобках).



Вопрос 2.5.

Закончите схемы превращений:



8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (5 семестр – зачёт с оценкой).

Билет для зачёта с оценкой включает контрольные вопросы по разделам 1-3 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса, по 20 баллов за вопрос.

1. Строение гетероциклических соединений. Основные конформации насыщенных и полностью сопряжённых пяти- и шестичленных гетероциклов. Основность и кислотность пиррола, пиридина, пиразола, имидазола, высших азинов. Таутомерия, сравнение равновесий 2-,3- и 4-гидроксипиридинов в растворах.
2. Базовые пятичленные гетероциклы. Механизм и условия реакции Паали-Кнорра синтеза пирролов и фуранов из ациклических предшественников, синтеза тиофенов и пирролов из фуранов. Сравнение устойчивости пятичленных гетероциклов в кислой и основной средах в ряду пиррол-фуран-тиофен-пиразол-имидазол-оксазолы.
3. Направление электрофильного замещения в пятичленных гетероциклах с одним гетероатомом, условия и используемые реагенты реакций нитрования, сульфирования, ацилирования, галогенирования. N- и C-направления алкилирования в пирролах. Депротонирование и металлизирование, цикловерсия (раскрытие цикла).
4. Базовые шестичленные гетероциклы. Механизм синтеза пиридинов по Ганчу и из солей пирилия. Реагенты окисления и восстановления шестичленных гетероциклических соединений.
5. Методы синтеза пиримидинов, пиразинов, пиридазинов, 1,2,3-, 1,2,4-, 1,3,5-триазинов. Нуклеофильное замещение, [3+2] диполярное циклоприсоединение и реакции Дильса-Альдера в ряду шестичленных гетероциклов как методы синтеза соединений других классов.
6. Методы синтеза бензannelированных пяти- и шестичленных гетероциклов. Бензимидазол, индазол, бензотриазол. Хинолин и изохинолин, хиназолин. Механизм реакции циклизации по Скраупу. Реакции с магнием- и литийорганическими реагентами. Соединения Рейссерта.
7. Малые и большие циклы: основные характеристики стабильности и направления реакционной способности. Угловое и торсионное напряжения, раскрытие и сужение циклов. Методы перехода от оксепинов к фенолам, от оксиранов к тиранам.
8. Элементоорганические циклы и трёхмерные кластерные соединения и системы. Реакционная способность карборанов и карборинов: алкилирование, циклоприсоединение и внедрение. Бора- и силациклопентадиены: методы синтеза и основные реакции. Азафуллерены.
9. Современные синтетические подходы в синтезе линейно связанных и полигетероциклических систем. Реакции Стилле, Хека, Сузуки в синтезе функциональных гетероциклов. Домино-реакции в синтезе полигетероциклов. Метатезис гетероциклов.
10. Аза-, бора-, тиа-, окса-полиароматические соединения (хризены, перопирены и др.) и их анионы: реакционная способность, методы синтеза. Химия мелема, мелона и методы получения графитоподобных нитридов углерода.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (5 семестр).

Зачёт с оценкой по дисциплине **«Гетероциклические структуры в материаловедении»** проводится в 5 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-3 рабочей программы дисциплины. Билет для **зачёта с оценкой** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **зачёта с оценкой**:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	Код и наименование направления подготовки Профиль – «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии»
	Гетероциклические структуры в материаловедении
Билет № 1 1. Малые и большие циклы: основные характеристики стабильности и направления реакционной способности. 2. Реакционная способность карборанов и карборинов: алкилирование, циклоприсоединение и внедрение. Бора- и силациклопентадиены: методы синтеза и основные реакции. Азафуллерены	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Миронович Л. М. Гетероциклические соединения с тремя и более гетероатомами. 2-е изд, стер. Москва, Издательство "Лань", 2022, 208 с.
2. Юровская М. А. Химия ароматических гетероциклических соединений. 2-е изд. Москва, Издательство "Лаборатория знаний", 2020, 211 с.
3. Титце Л., Браше Г., Герике К. Domino-реакции в органическом синтезе. 4-е изд. Москва, Издательство "Лаборатория знаний", 2021, 674 с.
4. Реутов О. А., Курц А. Л., Бутин К. П. Органическая химия : в 4 ч. Ч. 1-4. 7-е, 8-е, 9-е и 10-е изд. Москва, Издательство "Лаборатория знаний", 2021, 570 с (Ч. 1), 626 с (Ч. 2), 547 с (Ч. 3), 729 с (Ч. 4).
5. Шабаров Ю. С. Органическая химия. Москва, Издательство "Лань", 2021, 848 с.

Б. Дополнительная литература

1. Берестовицкая В.М., Липина Э.С. Химия гетероциклических соединений: учебное пособие. 2-е изд., перераб. Москва, Издательство "Лань", 2019, 256 с.
2. Гаврилова Н. А. Химия гетероциклических соединений. Азотсодержащие гетероциклы: Учебное пособие. Красноярск, Издательство "Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М. Ф. Решетнёва", 2018, 96 с.
3. Суздалев К.Ф. Основы химии гетероциклических соединений: Учебное пособие. Ростов-на-Дону, Издательство "Южный федеральный университет", 2018, 103 с.
4. Галочкин А.И., Ананьина И.В. Органическая химия. Книга 4. Гетерофункциональные и гетероциклические соединения: учебное пособие. 2-е изд., испр. Москва, Издательство "Лань", 2019, 292 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям
- Журнал органической химии
- Известия Академии Наук, Серия Химическая (РАН)
- Химия Гетероциклических Соединений (Latvian Institute of organic synthesis)
- Organic Letters (ACS)
- Chemical Communications (RSC)
- RSC Advances (RSC)
- Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements
- Journal of Sulfur Chemistry
- Polycyclic Aromatic Compounds
- Journal of Heterocyclic Chemistry
- Journal of Organometallic Chemistry
- Organometallics (ACS)
- Journal of Organic Chemistry (ACS)
- Journal of the American Chemical Society (ACS)
- Angewandte Chemie International Edition (GDCh)
- Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie
- Zeitschrift für Naturforschung B

- Chemistry – A European Journal
- European Journal of Organic Chemistry
- Asian Journal of Organic Chemistry
- Nature Chemistry
- Chemical Reviews (ACS)
- Поисковая система органических соединений и реакций «Reaxys»
- Поисковая система органических соединений и реакций «Sci-Finder»

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 200);
- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 300);

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Гетероциклические структуры в материаловедении»* проводятся в форме лекционных и семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие

компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Общие представления	<i>Знает:</i> основные термины и понятия химии гетероциклических соединений; номенклатуру химии гетероциклических соединений; <i>Владеет:</i> современными синтетическими методами применительно к химии гетероциклических соединений	Оценка за контрольную работу №1 (5семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (5 семестр)
Раздел 2. Макроциклы	<i>Знает:</i> типы реакционной способности гетероцикла исходя из его структурной формулы ; современные тенденции химии гетероциклов, их применение; <i>Умеет:</i> планировать синтез целевой структуры на основе базовых принципов создания гетероциклического ядра путем циклизаций или рециклизаций; <i>Владеет:</i> современными синтетическими методами применительно к химии гетероциклических соединений	Оценка за контрольную работу №2 (5семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (5 семестр)
Раздел 3. Ретросинтетический анализ	<i>Знает:</i> современные тенденции химии гетероциклов, их применение; <i>Умеет:</i> планировать синтез целевой структуры путем введения и модификации функций в различные положения гетероцикла (на основе изученных паттернов реакционной способности) <i>Владеет:</i> современными синтетическими методами применительно к химии гетероциклических соединений	Оценка за <i>зачёт</i> (5 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе

_____ А. М. Макуренков

« _____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Иностранный язык»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
« _____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена ассистентом кафедры Сколтеха Лаврентьевым П. А.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение четырёх семестров.

Дисциплина «**Иностранный язык**» относится к Обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области иностранного языка в объеме средней школы.

Цель дисциплины – приобретение обучающимися общей, коммуникативной и профессиональной компетенций, уровень которых на отдельных этапах языковой подготовки позволяет использовать иностранный язык практически как в профессиональной (производственной и научной) деятельности, так и для целей самообразования.

Задачи дисциплины

- подготовка к профессионально-ориентированному общению на иностранном языке в виде письменной и устной речи путем создания у студентов пассивного и активного запаса лексики, в том числе общенаучной и специальной терминологии, необходимой для работы над типовыми текстами;
- отработка списка грамматических тем, типичных для стиля разговорной и научной речи;
- формирование базовых навыков перевода, на основе рекомендованных в программе учебников и учебных пособий по иностранным языкам для химических вузов.

Дисциплина «**Иностранный язык**» преподается в 1, 2, 3 и 4 семестрах. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Коммуникация	УК-4. Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной	УК-4.3. Ведет деловую переписку на иностранном языке с учетом особенностей стилистики официальных писем и социокультурных различий УК-4.4. Выполняет для личных целей перевод

	формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(ых) языке(ах)	официальных и профессиональных текстов с иностранного языка на русский, с русского языка на иностранный; Б-УК-4.6. Устно представляет результаты своей деятельности на иностранном языке, может поддержать разговор в ходе их обсуждения

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Представление результатов профессиональной деятельности	ОПК-6 Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	ОПК-6.3. Представляет результаты работы в виде тезисов доклада на русском и английском языке в соответствии с нормами и правилами, принятыми в химическом сообществе ОПК-6.4. Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языках

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные способы сочетаемости лексических единиц и основные словообразовательные модели;
- русские эквиваленты основных слов и выражений речи в процессе межличностного и межкультурного взаимодействия;
- основные приемы и методы реферирования и аннотирования литературы;
- пассивную и активную лексику, в том числе общенаучную и специальную терминологию, необходимую для работы над типовыми текстами;
- приемы работы с оригинальной литературой на иностранном языке.

Уметь:

- работать с оригинальной литературой на иностранном языке;
- работать со словарем;
- вести переписку на изучаемом языке с целью межличностного и межкультурного взаимодействия;
- вести речевую деятельность применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации.

Владеть:

- иностранным языком на уровне межличностного и межкультурного общения, навыками и умениями речевой деятельности применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации, основами публичной речи;

- основами реферирования и аннотирования литературы на изучаемом иностранном языке.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего		Семестр							
			1		2		3		4	
	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	12	432	3	108	3	108	3	108	3	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	8,8	320	2,2	80	2,2	80	2,2	80	2,2	80
Лекции	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Практические занятия (ПЗ)	8,8	320	2,2	80	2,2	80	2,2	80	2,2	80
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Самостоятельная работа	3,2	112	0,8	28	0,8	28	0,8	28	0,8	28
Контактная самостоятельная работа	3,2	0,8	0,8	0,2	0,8	0,2	0,8	0,2	0,8	0,2
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		111,2		27,8		27,8		27,8		27,8
Вид итогового контроля:			Зачет		Зачет		Зачет		Зачет	

Вид учебной работы	Всего		Семестр							
			1		2		3		4	
	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	12	324	3	81	3	81	3	81	3	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	8,8	237	2,2	59,4	2,2	59,4	2,2	59,4	2,2	59,4
Лекции	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Практические занятия (ПЗ)	8,8	237	2,2	59,4	2,2	59,4	2,2	59,4	2,2	59,4
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Самостоятельная работа	3,2	87	0,8	21,75	0,8	21,75	0,8	21,75	0,8	21,75
Контактная самостоятельная работа	3,2	0,6	0,8	0,15	0,8	0,15	0,8	0,15	0,8	0,15
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		86,4		21,6		21,6		21,6		21,6
Вид итогового контроля:			Зачет		Зачет		Зачет		Зачет	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Акад. часов			Сам. работа
			Лек-ции	Прак. зан.	Лаб. работы	
1.	Раздел 1. Грамматические и лексические трудности изучаемого языка	108	-	80	-	28
1.1	Спряжение и изменение глагола-связки в формах настоящего времени. Видовременные формы глаголов. Образование форм простых, продолженных, перфектных и перфектно-продолженных времен глагола. Вопросительные предложения в различных временах. Образование отрицательных форм глагола в различных временах.	17	-	12	-	5
1.2	Согласование времен. Условные предложения.	14,5	-	10	-	4,5
1.3	Образование простых, продолженных, перфектных времен глагольных форм и употребление форм страдательного залога.	16,5	-	12	-	4,5
1.4	Причастия. Причастия настоящего и прошедшего времени. Перфектные формы причастия. Место причастий в предложении. Абсолютный причастный оборот	14,5	-	12	-	4,5
1.5	Инфинитив. Формы инфинитива. Продолженный и перфектный инфинитив. Функции инфинитива в предложении. Образование и употребление инфинитивных оборотов типа «сложное подлежащее» и «сложное дополнение».	14,5		10		4,5
1.6.	Модальные глаголы. Структура предложения. Принципы словообразования. Сокращения (аббревиатуры). Обозначение даты Правила чтения химических элементов, обозначений и формул неорганических соединений и уравнений химических реакций. Правила чтения единиц измерения. Правила чтения наименований основных органических соединений.	17		12		5
2.	Раздел 2. Развитие навыков чтения тематических текстов.	108	-	80	-	28
2.1	Развитие навыков чтения профессионально-ориентированных текстов. Чтение текстов по темам: 1. Введение в специальность 2. Д.И. Менделеев 3. РХТУ им. Д.И. Менделеева	50	-	40	-	10

	4. Наука и научные методы, научные статьи 5. Современные отрасли науки: 5.1. Проблемы коллоидной химии 5.2. Высокомолекулярные соединения 5.3. Химические основы биологических процессов 5.4. Механизмы органических реакций 5.5. Неорганический катализ органических реакций 5.6. Координационная химия неорганических веществ 5.7. Вычислительные методы в неорганической химии 5.8. Элементы бионеорганической химии 5.9. Экология и неорганическая химия 5.10. Проблемы аналитической химии 6. Химическое предприятие 7. Химическая лаборатория. Техника безопасности в лаборатории. Измерения в химической лаборатории 8. Химия будущего. 9. Биотехнология Фармацевтические производства. 10. Зеленая химия. Проблемы экологии					
2.2	Понятие о видах чтения. Просмотровое чтение на примерах текстов о химии, Д.И. Менделеев, РХТУ им, Д.И. Менделеева. Активизация лексики прочитанных текстов.	18	-	10	-	8
2.3	Изучающее чтение научных и научно-популярных текстов по выбранной специальности. Примерная тематика текстов: «Наука и научные методы», «Химическое предприятие», «Современные отрасли науки», «Химическая лаборатория. Техника безопасности в лаборатории», Измерения в химической лаборатории», «Химия будущего», «Современные тенденции развития науки», «Биотехнология», «Фармацевтические производства», «Зеленая химия. Проблемы экологии». Лексические особенности текстов научно-технической направленности. Терминология научно-технической литературы на изучаемом языке.	40	-	30	-	10
	Раздел 3. Практика устной речи	108	-	80	-	28
3.1	Практика устной речи по темам: 1. «Говорим о себе, о своей будущей профессии»; 2. «Мой университет»; 3. «Университетский кампус»; 4. «At the bank»; 5. «Applying for a job» и т.д.	40	-	30	-	10
3.2	Монологическая речь по теме «о себе и о будущей профессии». Лексические особенности монологической речи.	40		30		10

3.3	Речевой этикет повседневного общения (знакомство, представление, установление и поддержание контакта, запрос и сообщение информации, побуждение к действию, выражение просьбы, согласия). Особенности диалогической речи по пройденным темам.	28		20		8
4.	Раздел 4. Особенности языка специальности	108	-	80	-	28
4.1	Грамматические и лексические трудности языка специальности: Различные варианты перевода причастий на русский язык. Причастные обороты и приемы их перевода на русский язык.	16	-	20	-	7
4.2	Сослагательное наклонение. Формы сослагательного наклонения в изучаемом языке. Модальные глаголы и их использование в предложениях в сослагательном наклонении. Типы условных предложений. Варианты перевода предложений в сослагательном наклонении и условных предложений. Порядок слов в предложении. Эмфатические конструкции.	16		20		7
4.3.	Изучение правил перевода различных форм инфинитива и инфинитивных оборотов на русский язык.	16		20		7
4.4	Изучающее чтение текстов по тематике: 1) «Лаборатория»; 2) «Измерения в химической лаборатории». Стилистические особенности специальной научно-технической литературы. Организация работы со специальными словарями. Понятие о реферировании и аннотировании текстов по специальности. Поиск новой информации при работе с текстами из периодических изданий и монографий, инструкций, проспектов и справочной литературы по рассматриваемой тематике.	15		20		7
		432		320		112

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Грамматические и лексические трудности изучаемого языка.

1.1 Спряжение и изменение глагола-связки в формах настоящего времени. Видовременные формы глаголов. Образование форм простых, продолженных, перфектных и перфектно-продолженных времен глагола. Вопросительные предложения в различных временах. Образование отрицательных форм глагола в различных временах.

1.2 Образование простых, продолженных, перфектных времен глагольных форм и употребление форм страдательного залога.

1.3 Видовременные формы глаголов в страдательном залоге. Образование простых, продолженных и перфектных времен. Вопросительные предложения в различных временах. Образование отрицательных форм глагола в различных временах страдательного залога.

1.4 Причастия. Причастия настоящего и прошедшего времени. Перфектные формы причастия. Место причастий в предложении. Абсолютный причастный оборот.

1.5 Инфинитив. Формы инфинитива. Продолженный и перфектный инфинитив. Функции инфинитива в предложении. Образование и употребление инфинитивных оборотов типа «сложное подлежащее» и «сложное дополнение».

1.6 Модальные глаголы. Структура предложения. Принципы словообразования. Сокращения (аббревиатуры). Обозначение даты. Правила чтения химических элементов, обозначений и формул неорганических соединений и уравнений химических реакций. Правила чтения единиц измерения. Правила чтения наименований основных органических соединений.

Раздел 2. Развитие навыков чтения тематических текстов.

2.1 Чтение текстов по темам:

2.1.1. Введение в специальность

2.1.2. Д.И. Менделеев

2.1.3. РХТУ имени Д.И. Менделеева

2.1.4. Наука и научные методы, научные статьи

2.1.5. Современные отрасли науки:

2.1.5.1. Проблемы коллоидной химии

2.1.5.2. Высокомолекулярные соединения

2.1.5.3. Химические основы биологических процессов

2.1.5.4. Механизмы органических реакций

2.1.5.5. Неорганический катализ органических реакций

2.1.5.6. Координационная химия неорганических веществ

2.1.5.7. Вычислительные методы в неорганической химии

2.1.5.8. Элементы бионеорганической химии

2.1.5.9. Экология и неорганическая химия

2.1.5.10. Проблемы аналитической химии

2.1.6. Химическое предприятие

2.1.7. Химическая лаборатория. Техника безопасности в лаборатории. Измерения в химической лаборатории

2.1.8. Химия будущего

2.1.9. Биотехнология Фармацевтические производства

2.1.10. Зеленая химия. Проблемы экологии

2.2 Понятие о видах чтения. Просмотровое чтение на примерах текстов о химии, Д.И. Менделееве, РХТУ имени Д.И. Менделеева

Активизация лексики прочитанных текстов.

2.3 Изучающее чтение научных и научно-популярных текстов по выбранной специальности на примере текстов: «Наука и научные методы», «Химическое предприятие», «Современные отрасли науки», «Химическая лаборатория», «Техника безопасности в лаборатории», «Измерения в химической лаборатории», «Химия будущего», «Современные тенденции развития науки», «Биотехнология», «Фармацевтические производства», «Зеленая химия», «Проблемы экологии».

Лексические особенности текстов научно-технической направленности. Терминология научно-технической литературы на изучаемом языке.

Раздел 3. Практика устной речи

3.1 Практика устной речи по темам:

3.1.1. «Говорим о себе, о своей будущей профессии»,

3.1.2. «Мой университет»,

3.1.3. «Университетский кампус»

3.1.4. «At the bank»

3.1.5. «Applying for a job» и т.д.

3.2 Монологическая речь по теме «о себе и о будущей профессии». Лексические особенности монологической речи.

3.3 Речевой этикет повседневного общения (знакомство, представление, установление и поддержание контакта, запрос и сообщение информации, побуждение к действию, выражение просьбы, согласия).

Особенности диалогической речи по пройденным темам.

Раздел 4. Особенности языка специальности

Грамматические трудности языка специальности:

4.1. Грамматические и лексические трудности языка специальности:

Различные варианты перевода причастий на русский язык. Причастные обороты и приемы их перевода на русский язык.

4.2. Сослагательное наклонение. Формы сослагательного наклонения в изучаемом языке. Модальные глаголы и их использование в предложениях в сослагательном наклонении. Типы условных предложений. Варианты перевода предложений в сослагательном наклонении и условных предложений. Порядок слов в предложении. Эмфатические конструкции.

4.3. Изучение правил перевода различных форм инфинитива и инфинитивных оборотов на русский язык.

4.4 Изучающее чтение текстов по тематике:

1) «Лаборатория»

2) «Измерения в химической лаборатории»

Стилистические особенности специальной научно-технической литературы. Организация работы со специальными словарями. Понятие о реферировании и аннотировании текстов по специальности. Поиск новой информации при работе с текстами из периодических изданий и монографий, инструкций, проспектов и справочной литературы по рассматриваемой тематике.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	- основные способы сочетаемости лексических единиц и основные словообразовательные модели;	+	+	+	
2	- русские эквиваленты основных слов и выражений речи в процессе межличностного и межкультурного взаимодействия;			+	+
3	- основные приемы и методы реферирования и аннотирования литературы;				+
4	- пассивную и активную лексику, в том числе общенаучную и специальную терминологию, необходимую для работы над типовыми текстами;	+	+		+
5	- приемы работы с оригинальной литературой на иностранном языке.		+		+
	Уметь:				
6	- работать с оригинальной литературой на иностранном языке;	+	+		+
7	- работать со словарем;		+		+
8	- вести переписку на изучаемом языке с целью межличностного и межкультурного взаимодействия;				+
9	- вести речевую деятельность применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации.			+	
	Владеть:				
10	- иностранным языком на уровне межличностного и межкультурного общения, навыками и умениями речевой деятельности применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации, основами публичной речи;		+	+	+
11	- основами реферирования и аннотирования литературы на изучаемом иностранном языке.				+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>универсальные и общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>					
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК			

12	УК-4. Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(ых) языке(ах)	УК-4.3. Ведет деловую переписку на иностранном языке с учетом особенностей стилистики официальных писем и социокультурных различий	+	+	+	+
		УК-4.4. Выполняет для личных целей перевод официальных и профессиональных текстов с иностранного языка на русский, с русского языка на иностранный;	+		+	
		Б-УК-4.6. Устно представляет результаты своей деятельности на иностранном языке, может поддержать разговор в ходе их обсуждения		+	+	+
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК				
13	ОПК-6 Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	ОПК-6.3. Представляет результаты работы в виде тезисов доклада на русском и английском языке в соответствии с нормами и правилами, принятыми в химическом сообществе		+	+	
		ОПК-6.4. Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языках		+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1.	Раздел 1	Спряжение и изменение глагола-связки в формах настоящего времени. Видовременные формы глаголов. Образование форм простых, продолженных, перфектных и перфектно-продолженных времен глагола. Вопросительные предложения в различных временах. Образование отрицательных форм глагола в различных временах.	4
2.	Раздел 1	Согласование времен. Условные предложения.	4
3.	Раздел 1	Образование простых, продолженных, перфектных времен глагольных форм и употребление форм страдательного залога.	3
4.	Раздел 1	Причастия. Причастия настоящего и прошедшего времени. Перфектные формы причастия. Место причастий в предложении. Абсолютный причастный оборот.	3
5.	Раздел 1	Инфинитив. Формы инфинитива. Продолженный и перфектный инфинитив. Функции инфинитива в предложении. Образование и употребление инфинитивных оборотов типа «сложное подлежащее» и «сложное дополнение».	3
6.	Раздел 1	Модальные глаголы. Структура предложения. Принципы словообразования. Сокращения (аббревиатуры). Обозначение даты. Правила чтения химических элементов, обозначений и формул неорганических соединений и уравнений химических реакций. Правила чтения единиц измерения. Правила чтения наименований основных органических соединений.	3
7.	Раздел 2	Чтение текстов по темам: 1. Введение в специальность 2. Д.И. Менделеев 3. РХТУ имени Д.И. Менделеева 4. Наука и научные методы, научные статьи 5. Современные инженерные технологии: 5.1. Безопасность в чрезвычайных ситуациях и гражданская защита 5.2. Безопасность электротехнических производств 5.3. Медико-биологические основы безопасности жизнедеятельности 5.4. Теория вероятностей при обеспечении безопасности жизнедеятельности 5.5. Управление техносферной безопасностью 5.6. Теория горения и взрыва 5.7. Надежность технических систем 5.8. Понятие техногенного риска 5.9. Надзор и контроль в сфере безопасности 5.10. Специальная оценка условий труда 6. Химическое предприятие 7. Химическая лаборатория. Техника безопасности в лаборатории.	7

		Измерения в химической лаборатории 8. Химия будущего. 9. Биотехнология Фармацевтические производства. 10. Зеленая химия. Проблемы экологии	
8.	Раздел 2	Понятие о видах чтения. Просмотровое чтение на примерах текстов о химии, Д.И. Менделееве, РХТУ им. Д.И. Менделеева. Активизация лексики прочитанных текстов.	7
9.	Раздел 2	Изучающее чтение научных и научно-популярных текстов по выбранной специальности. Примерная тематика текстов: «Наука и научные методы», «Химическое предприятие», «Современные инженерные технологии» «Химическая лаборатория. Техника безопасности в лаборатории. Измерения в химической лаборатории» «Химия будущего. Современные тенденции развития науки», «Биотехнология. Фармацевтические производства», «Зеленая химия. Проблемы экологии». Лексические особенности текстов научно-технической направленности. Терминология научно-технической литературы на изучаемом языке.	6
10.	Раздел 3	Практика устной речи по темам: 1. «Говорим о себе, о своей будущей профессии», 2. «Мой университет», 3. «Университетский кампус» 4. «At the bank» 5. «Applying for a job» и т.д.	7
11.	Раздел 3	Монологическая речь по теме «о себе и о будущей профессии». Лексические особенности монологической речи.	7
12.	Раздел 3	Речевой этикет повседневного общения (знакомство, представление, установление и поддержание контакта, запрос и сообщение информации, побуждение к действию, выражение просьбы, согласия). Особенности диалогической речи по пройденным темам.	6
13.	Раздел 4	Грамматические и лексические трудности языка специальности: Различные варианты перевода причастий на русский язык. Причастные обороты и приемы их перевода на русский язык.	5
14.	Раздел 4	Варианты перевода предложений в сослагательном наклонении и условных предложений. Порядок слов в предложении. Эмфатические конструкции.	5
15.	Раздел 4	Изучение правил перевода различных форм инфинитива и инфинитивных оборотов на русский язык.	5
16.	Раздел 4	Изучающее чтение текстов по тематике: 1) «Лаборатория» 2) «Измерения в химической лаборатории». Стилистические особенности специальной научно-технической литературы. Организация работы со специальными словарями. Понятие о реферировании и аннотировании текстов по специальности. Поиск новой информации при работе с текстами из периодических изданий и монографий, инструкций, проспектов и справочной литературы по рассматриваемой	5

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторные занятия по дисциплине не предусмотрены.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;

- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **зачёта** (1-4 семестры) и лабораторного практикума по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине в 1 семестре складывается из оценок за выполнение контрольной работы (максимальная оценка 60 баллов), домашних заданий (максимальная оценка 30 баллов) и оценки за реферат (максимальная оценка 10 баллов).

Совокупная оценка по дисциплине во 2 семестре складывается из оценок за выполнение контрольной работы (максимальная оценка 60 баллов), домашних заданий (максимальная оценка 30 баллов) и оценки за реферат (максимальная оценка 10 баллов).

Совокупная оценка по дисциплине в 3 семестре складывается из оценок за выполнение контрольной работы (максимальная оценка 60 баллов), домашних заданий (максимальная оценка 30 баллов) и оценки за реферат (максимальная оценка 10 баллов).

Совокупная оценка по дисциплине в 4 семестре складывается из оценок за выполнение контрольной работы (максимальная оценка 60 баллов), домашних заданий (максимальная оценка 30 баллов) и оценки за реферат (максимальная оценка 10 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Перечень примерных тем текстов для составления рефератов (реферативных аннотаций):

1. Проблемы коллоидной химии
2. Высокомолекулярные соединения
3. Химические основы биологических процессов
4. Механизмы органических реакций
5. Неорганический катализ органических реакций
6. Координационная химия неорганических веществ
7. Вычислительные методы в неорганической химии

8. Элементы бионеорганической химии
9. Экология и неорганическая химия
10. Проблемы аналитической химии

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 4 контрольных работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольную работу 1 (1 семестр) составляет 60 баллов. Максимальная оценка за контрольную работу 2 (2 семестр) составляет 60 баллов. Максимальная оценка за контрольную работу 3 (3 семестр) составляет 60 баллов. Максимальная оценка за контрольную работу 4 (4 семестр) составляет 60 баллов.

Контрольная работа № 1. Примеры заданий к контрольной работе

№ 1. Контрольная работа содержит 4 задания: 1 задание: Письменный перевод текста (800 печ. зн.) – **15 баллов, 2 задание:** Контроль лексики (50 лексических единиц) – **10 баллов, 3 задание:** Лексико-грамматический тест на видовременные формы английского глагола – **10 баллов, 4 задание:** беседа по одной из устных тем: About my future profession; What is chemistry? Chemistry disciplines; Chemistry and matter; Science and Scientific Methods; The research paper – **20 баллов.**

1.Письменный перевод текста:

INORGANIC CHEMISTRY

Inorganic chemistry is the study of the synthesis and behavior of inorganic and organometallic compounds. This field covers all chemical compounds except the myriad organic compounds (carbon based compounds, usually containing C-H bonds), which are the subjects of organic chemistry. The distinction between the two disciplines is far from absolute, most importantly in the sub-discipline of organometallic chemistry. It has applications in every aspect of the chemical industry including catalysis, materials science, pigments, surfactants, coatings, medicine, fuel, and agriculture.

3. Many inorganic compounds are ionic compounds, consisting of cations and anions joined by ionic bonding. Important classes of inorganic salts are the oxides, the carbonates, the sulfates and the halides. Many inorganic compounds are characterized by high melting points. Inorganic salts typically are poor conductors in the solid state.

2.Контроль лексики – 50 лексических единиц: compound, particularly, to lead, averaging, reaction, determination, medicine, absorption, to create, explosive, hardness, heat, environment, material, waste, approximate, gasoline, activation, to cause, definition, measurement, to decrease, to arise, observation, development, to search for, error, harmful, to vary, to carry, to investigate, researcher, to suggest, survey, to retain, to state, to describe, rigorous, to disappear, synthesis, accompany, application, to achieve, fluid, technique, fiber, relationship, to find out, density, behavior

3.Лексико-грамматический тест на видовременные формы английского глагола:

1. He ... books very often.

- a) not buy b) doesn't buy c) don't buy

2. Where ... you ... at 6 p.m.?

- a) will ... be b) shall ... be c) will ... have been

3. I ... anything since morning.

- a) wasn't eating b) haven't eaten c) didn't eat

4. I came home while my mother ... dinner.

- a) has cooked b) cooked c) was cooking

5. We ... to the radio now.

- a) are listening b) listens c) listen
 6. Many people today ... easier lives.
 a) had b) have c) will have
 7. ... you ... this method now?
 a) Do ... study b) Are ... studying c) Have ... studied
 8. She ... this book from 7 to 10 p.m.
 a) will be reading b) will read c) will have read
 9. I ... at this plant 5 years ago.
 a) have worked b) had worked c) worked
 10. I ... never ... to Pskov.
 a) have ... been b) had ... been c) - ... was

4. Беседа по устной теме: Science and Scientific Methods

Раздел 2. Контрольная работа № 2. Примеры заданий к контрольной работе №

2. Контрольная работа содержит 5 заданий: 1 задание: Письменный перевод текста (1000 печ. зн.) – **20 баллов, 2 задание:** Письменный перевод 10 предложений (без словаря) – **10 баллов, 3 задание:** Контроль лексики (50 лексических единиц) – **10 баллов, 4 задание:** Устный перевод текста на понимание общего содержания – **10 баллов, 5 задание:** беседа по одной из устных тем: About my future profession; What is chemistry? Chemistry disciplines; Chemistry and matter; Science and Scientific Methods; The research paper; The chemistry of tomorrow – **10 баллов.** Письменный перевод текста:

More than two thousand five hundred years ago man first arrived at the thought that the universe is composed of atoms. This idea was most perfectly expressed by Democritus, the great Greek philosopher. According to Democritus, all bodies in nature are built up of minute, indivisible particles – atoms. Atoms are so small that they cannot be seen. They may be different in shape and size. The differences between substances depend on differences in the number, shape and arrangement of the atoms they consist of. Atoms are in eternal motion.

The materialistic teachings of Democritus were far in advance of the views of his contemporaries, but did not receive general recognition.

According to the opinion prevailing today, chemistry as a science arose at the beginning of our era in Alexandria, a city on the Nile. Alexandria was an immense commercial and cultural centre. It concentrated the practical knowledge of Egypt and developed the philosophical ideas of ancient Greece. Treatises written in Alexandria in the first century of our era contained a great deal of chemical information, many illustrations showing chemical apparatus, and descriptions of calcining, volatilizing, filtering, dissolving, and crystallizing.

2. Письменный перевод предложений (без словаря):

1. She said that she would carry out the research in a new laboratory.
2. I said that he would come to the university.
3. Since the content of aromatic amino acids is constant between proteins this technique can't be used.
4. Learn the properties of the substances and verify everything lest you should get wrong data in your experiment.
5. If we were in a chemical laboratory, we would ask our teacher to explain this phenomenon.
6. If you take this book you will read the article about the history of chemistry.
7. He said that he would come here once more to verify the data.
8. If I increase the temperature, I'll be able to accelerate the speed of that chemical reaction.
9. This compound may be build up from the combination of water with substances.
10. He suggested that that work should be done in that laboratory.

3. Контроль лексики – 50 лексических единиц: to suggest, hypothetical, sustainable, nitrogen, disaster, witness, the expertise, innovation, species, previous, invention, lack in, extinction, to emit, to ignite, evidence, to survive, nuclear, to conceivable, population, chemical,

agriculture, consultation efficient, solar, system, vessels, efficiency, futurology, challenges, scientific, enough, to prevent, to result in, to consider, steam, to require, community, approach, society, dismal, technology, enough, movement, excellence, futuristic, within, engine, engineering, breakthroughs.

4. Устный перевод текста на понимание общего содержания:

Chemists study substances to learn as much as they can about their properties (their characteristic qualities) and about the reactions that change them into other substances. Knowledge obtained in this way has been found to be extremely valuable. Since some substances (like morphine and cocaine), may have undesirable properties along with the positive ones, we should test such substances for their powers of deadening pain and of producing addiction very thoroughly.

In the beginning, some methods carried out in laboratories were really dangerous, e.g. a young investigator, H. Davy tested many gases on himself by inhaling them. He discovered that one gas (named laughing gas), produced a state of hysteria when inhaled, and that people seemed not to suffer pain when they fell down or bumped into an object. It is rather surprising, but that gas was not

suggested to be used in surgical operations right after its discovery. No one seems to have had this idea, and the use of anesthetics was delayed for nearly half a century. 5. Беседа по устной теме: Chemistry and matter.

Раздел 3. Контрольная работа № 3. Примеры заданий к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 4 задания: 1 задание: Письменный перевод текста (1000 печ. зн.) – **20 баллов, 2 задание:** Письменный перевод 10 предложений (без словаря) – **10 баллов, 3 задание:** Контроль лексики (50 лексических единиц) – **10 баллов, 4 задание:** беседа по одной из устных тем: About my future profession; What is chemistry? Chemistry disciplines; Laboratory; Lab Safety; Laboratory of the Analytical Chemistry; From chemical science to the lab – **20 баллов**

1. Письменный перевод текста:

DRYING

A desiccator is a vessel in which a dry atmosphere can be maintained, and which can be made gas-tight. It is employed for a variety of purposes. Crucibles are allowed to cool, before weighing in the desiccator; weighing bottles containing substances for analysis may be kept therein; crystals may be dried, or liquids evaporated, especially in the vacuum form of apparatus. The drying agent, sulphuric acid with or without pumice, or anhydrous calcium chloride, is placed in the lower part of the vessel. Calcium chloride is preferable to a liquid in an apparatus which has to be carried to and fro, and for vacuum desiccators sulphuric acid should not be used. The drying of a solid substance may be assisted greatly by spreading it on a porous clay plate, especially if it is finely divided. The clay absorbs the water slowly; the drying may be further accelerated by placing the plate in the vacuum desiccator. Great care must be exercised in the drying of all substances which are affected by heat, as, e.g. salts containing water of crystallization. Such bodies must be dried at low temperatures.

2. Письменный перевод предложений:

1. Provided she had this book, she would read it.
2. After finishing our work, we went for a walk.
3. We know of the new plant having been built in this region.
4. By using this method we can get a good result.
5. If they had got the necessary equipment, they would have done their research work.
6. He hardly knows it.
7. Having carried out a series of experiments, we could obtain the necessary data.
8. The section closes with the procedural protection of property interests.
9. If I were you I wouldn't buy this car.
10. If you earn a lot of money where will you go on holiday?

3. Контроль лексики – 50 лексических единиц: to accumulate, agent, approach to, characteristics, extreme, precautions, measurement, specific, glassware, poison, entrance, apparatus, enough, cylinder, emergency, condenser, various, injury, funnel, to authorize for, requirement, safety goggles, vessel, intensity, facilities, accident, source, to avoid, ventilator, fumes, beaker, explosive, bottom, quartz, flammable, burette, to eliminate, clay, crucible, vapour, graduated, fire extinguisher, desiccators, bulb, first-aid, immediately, burner, stopper, flask, hazard.

4. Беседа по устной теме: Lab Safety.

Раздел 4. Контрольная работа № 4. Примеры заданий к контрольной работе № 4.

Контрольная работа содержит 4 задания: 1 задание: Письменный перевод текста (1000 печ. зн) – **20 баллов, 2 задание:** Лексико-грамматический тест: – **10 баллов, 3 задание:** Устный перевод текста (без словаря) на понимание общего содержания (600 печ. зн) – **10 баллов, 4 задание:** беседа по одной из устных тем: About my future profession; What is chemistry? Chemistry disciplines; Laboratory; Lab Safety; Laboratory of the Analytical Chemistry; From chemical science to the lab; Chemistry and matter; The chemistry of tomorrow; Technology-**20 баллов.**

1. Письменный перевод текста:

HOME CHEMISTRY LAB

How to set up a home chemistry lab

Chemistry is science that usually involves laboratory experiments and projects. You may want to set up a home chemistry lab to aid in your investigations. How do you do it? Here's some advice for setting up your own home chemistry lab.

1. Define Your Lab Bench

In theory, you could do your chemistry experiments anywhere, but if you live with other people you need to let them know which area contains projects which may be toxic or shouldn't be disturbed. There are other considerations, too, such as spill containment, ventilation, access to power and water, and fire safety. Common home locations for a chemistry lab include a garage, a shed, an outdoor grill and table, a bathroom, or a kitchen counter. I work with a fairly benign set of chemicals, so I use the kitchen for my lab. One counter is jokingly referred to as 'the counter of science'. Anything on this counter is considered off-limits by family members. It is a "do not drink" and "do not disturb" location.

2. Лексико-грамматический тест:

1. A number of physical elements (such as platinum, mercury, tin and zinc) ... from antiquity.

a) has known b) have known c) have been known

2. The Periodic Table included the 66 known elements ... by atomic weights.

a) organize b) organized c) organizes

3. The history of the periodic table reflects over a century of growth in ... of chemical properties.

a) understands b) understand c) the understanding

4. Unknown to Mendeleev, Lothar Meyer ... also working on a periodic table.

a) was b) were c) has

5. Newlands noted that many pairs of similar elements ..., which differed by some multiple of eight in mass number.

a) existing b) exists c) existed

6. Lavoisier defined an element as a substance that cannot be broken down ... a simpler substance by a chemical reaction.

a) at b) - c) into

7. Synthetic radioisotopes of naturally ... elements have been produced in laboratories.

a) occurring b) occur c) occurs

8. Only a minority of elements ... found uncombined as relatively pure minerals.

a) have b) is c) are

9. Each chemical element has a unique atomic number ... the number of protons in its nucleus.

a) representing b) represent c) have represented

10. The elements ... to date as solid samples have eight kinds of crystal structures.

a) studies b) studied c) has studied

3. Устный перевод текста (без словаря):

4. Gather Lab Equipment

You can order the usual chemistry lab equipment from a scientific supply company that sells to the general public, but many experiments and projects can be conducted using home equipment, like measuring spoons, coffee filters, glass jars, and string.

5. Separate Home from Lab

Many of the chemicals you might use can be safely cleaned from your kitchen cookware. However, some chemicals pose too great a health risk (e.g., any compound containing mercury). You may wish to maintain a separate stock of glassware, measuring utensils, and cookware for your home lab. Keep safety in mind for clean-up, too. Take care when rinsing chemicals down the drain or when disposing of paper towels or chemicals after your experiment has been completed.

4. Беседа по устной теме: The Periodic Table.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины

Итоговый контроль по дисциплине не предусмотрен.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Кузнецова Т.И. Воловикова Е.В. Кузнецов И.А. Английский язык для химиков – технологов. Учебное пособие. М. РХТУ, 2017 г.

2. Кузнецова Т.И., С.Н. Катранов, Кузнецов И.А., Коваленко Н.Г. Английский язык. Учебное пособие по практике устной речи. РХТУ, Москва, 2015 г.

3. Кузнецова Т.И., Катранов С.Н. Сборник упражнений по основным разделам грамматики английского языка. РИЦ МГГУ им. М.А. Шолохова, М., 2018 г.

4. Кузнецова Т.И. Английский язык. Методические указания к практическим занятиям по теме: Структура предложения. РИЦ МГГУ им. М.А. Шолохова, М., 2012 г.

5. Кузнецов И.А., Кузнецова Т.И., Дистанционный образовательный электронный курс «Английский язык для профессиональной коммуникации» размещённый в ЭСУО Moodle [Электронный ресурс]: учебное пособие / И.А. Кузнецов, Т.И. Кузнецова — Электрон. дан. — Москва: РХТУ, 2018.

6. Беляева, И.В. Иностранный язык в сфере профессиональной коммуникации: комплексные учебные задания [Электронный ресурс]: учебное пособие / И.В. Беляева, Е.Ю. Нестеренко, Т.И. Сорогина. — Электрон. дан. — Москва: ФЛИНТА, 2017. — 132 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92749>.

Б. Дополнительная литература

1. Кузнецова Т.И. Методические указания по курсу «Английский язык». Грамматические тесты. М.: РХТУ, 2016 г.

2. М.Г. Рубцова. Чтение и перевод научной и технической литературы: лексико-грамматический справочник. Учебник. 2-е изд. испр. и доп. М.: Астрель: АСТ, 2017 г.

3. Серебрянникова Э.И., Круглякова И.Е. Учебник английского языка для химико-технологических вузов. Москва. Альянс 2009 г.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

1. Directory of Open Access Journals (DOAJ) <http://doaj.org/>
Ресурс объединяет более 10000 научных журналов по различным отраслям знаний (около 2 миллионов статей) из 134 стран мира.
2. Directory of Open Access Books (DOAB) <https://www.doabooks.org/>
В базе размещено более 3000 книг по различным отраслям знаний, предоставленных 122 научными издательствами.
3. BioMed Central <https://www.biomedcentral.com/>
База данных включает более 300 рецензируемых журналов по биомедицине, медицине и естественным наукам. Все статьи, размещенные в базе, находятся в свободном доступе.
4. Электронный ресурс arXiv <https://arxiv.org/>
Крупнейшим бесплатный архив электронных научных публикаций по разделам физики, математики, информатики, механики, астрономии и биологии. Имеется подробный тематический каталог и возможность поиска статей по множеству критериев.
5. Коллекция журналов MDPI AG <http://www.mdpi.com/>
Многодисциплинарный цифровой издательский ресурс, является платформой для рецензируемых научных журналов открытого доступа, издающихся MDPI AG (Базель, Швейцария). Издательство выпускает более 120 разнообразных электронных журналов, находящихся в открытом доступе.
6. Издательство с открытым доступом InTech <http://www.intechopen.com/>
Первое и крупнейшее в мире издательство, публикующее книги в открытом доступе, около 2500 научных изданий. Основная тематическая направленность - физические и технические науки, технологии, медицинские науки, науки о жизни.
7. База данных химических соединений ChemSpider <http://www.chemspider.com/>
ChemSpider – это бесплатная химическая база данных, предоставляющая быстрый доступ к более чем 28 миллионам структур, свойств и соответственной информации. Ресурс принадлежит Королевскому химическому обществу Великобритании (Royal Society of Chemistry).
8. Коллекция журналов PLOS ONE <http://journals.plos.org/plosone/>
PLOS ONE – коллекция журналов, в которых публикуются отчеты о новых исследованиях в области естественных наук и медицины. Все журналы размещены в свободном доступе (Open Access), все статьи проходят строгое научное рецензирование.
9. US Patent and Trademark Office (USPTO) <http://www.uspto.gov/>

Ведомство по патентам и товарным знакам США — USPTO — предоставляет свободный доступ к американским патентам, опубликованным с 1976 г. По настоящее время.

10. Espacenet - European Patent Office (EPO) <http://worldwide.espacenet.com/>
Патенты (либо патентные заявки) более 50 национальных и нескольких международных патентных бюро, в том числе полные тексты патентов США, России, Франции, Японии и др.

11. Федеральный институт промышленной собственности (ФИПС)
http://www1.fips.ru/wps/wcm/connect/content_ru/ru
Информационные ресурсы ФИПС свободного доступа:

- Электронные бюллетени. Изобретения. Полезные модели.
- Открытые реестры российских изобретений и заявок на изобретения.
- Рефераты российских патентных документов за 1994–2016 гг.
- Полные тексты российских патентных документов из последнего официального бюллетеня.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:
сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Иностранный язык*» проводятся в форме семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Аудитория с доской, компьютером, проектором и экраном.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проектор; экран; аудитория со стационарным комплексом отображения информации с электронного носителя; сканер; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Грамматические и лексические трудности изучаемого языка	<i>Знает:</i> - основные способы сочетаемости лексических единиц и основные словообразовательные модели; - пассивную и активную лексику, в том числе общенаучную и специальную терминологию, необходимую для работы над типовыми текстами; <i>Умеет:</i> - работать с оригинальной литературой на иностранном языке;	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр) Оценка за реферат (1 семестр)
Раздел 2. Развитие навыков	<i>Знает:</i>	

чтения тематических текстов.	- основные способы сочетаемости лексических единиц и основные словообразовательные модели; - пассивную и активную лексику, в том числе общенаучную и специальную терминологию, необходимую для работы над типовыми текстами; - приемы работы с оригинальной литературой на иностранном языке. <i>Умеет:</i> - работать с оригинальной литературой на иностранном языке; - работать со словарем;. <i>Владеет:</i> - иностранным языком на уровне межличностного и межкультурного общения, навыками и умениями речевой деятельности применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации, основами публичной речи;	Оценка за контрольную работу №2 (2 семестр) Оценка за реферат (2 семестр)
Раздел 3. Практика устной речи	<i>Знает:</i> - основные способы сочетаемости лексических единиц и основные словообразовательные модели; - русские эквиваленты основных слов и выражений речи в процессе межличностного и межкультурного взаимодействия; <i>Умеет:</i> - вести речевую деятельность применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации. <i>Владеет:</i> - иностранным языком на уровне межличностного и межкультурного общения, навыками и умениями речевой деятельности применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации, основами публичной речи;	Оценка за контрольную работу №3 (3 семестр) Оценка за реферат (3 семестр)

Раздел 4. Особенности языка специальности	<i>Знает:</i> - русские эквиваленты основных слов и выражений речи в процессе межличностного и межкультурного взаимодействия; - основные приемы и методы реферирования и аннотирования литературы; - пассивную и активную лексику, в том числе общенаучную и специальную терминологию, необходимую для работы над типовыми текстами; - приемы работы с оригинальной литературой на иностранном языке. <i>Умеет:</i> - работать с оригинальной литературой на иностранном языке; - работать со словарем; - вести переписку на изучаемом языке с целью межличностного и межкультурного взаимодействия; <i>Владеет:</i> - иностранным языком на уровне межличностного и межкультурного общения, навыками и умениями речевой деятельности применительно к сфере бытовой и профессиональной коммуникации, основами публичной речи; - основами реферирования и аннотирования литературы на изучаемом иностранном языке	Оценка за контрольную работу №4 (4семестр) Оценка за реферат (4 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Линейная алгебра и математический анализ »

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена ассистентом кафедры Сколтеха к.ф.-м.н. Лободой А.А.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева « 26 » августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки бакалавров **04.03.01 Химия**, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой Сколтеха РХТУ им. Д.И.Менделеева. Программа рассчитана на изучение курса в течение трёх семестров.

Дисциплина **«Линейная алгебра и математический анализ»** относится к обязательной части блока дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую подготовку в области основ элементарной математики, изучаемой в школьном курсе.

Целью дисциплины является формирование у студентов системы основных понятий, используемых для построения важнейших математических моделей, и математических методов для описания различных химико-технологических процессов.

Задачи дисциплины «Линейная алгебра и математический анализ»

- создание фундаментальной математической базы,
- развитие навыков математического мышления и использования их для решения практических задач.

Дисциплина **«Линейная алгебра и математический анализ»** преподается в 1-3 семестрах. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретения следующих компетенций:

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Физико-математическая и компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ОПК-4.1. Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности ОПК-4.2. Обрабатывает данные с использованием стандартных способов аппроксимации численных характеристик

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

знать:

- основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений
- математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей;
- основы применения математических моделей и методов.

уметь:

- выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи;
- использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов;
- выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов;

- использовать основные методы статистической обработки данных;
 - применять математические знания на междисциплинарном уровне.
- владеть:**
- основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;
 -

3. ОБЪЕМ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Семестр							
	Всего		1		2		3	
	ЗЕ	Акад.ч.	ЗЕ	Акад.ч.	ЗЕ	Акад.ч.	ЗЕ	Акад.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	15	540	3	108	6	216	6	216
Контактная работа – аудиторные занятия:	9	320	1,8	64	3,6	128	3,6	128
Лекции	4,5	160	0,9	32	1,8	64	1,8	64
Практические занятия (ПЗ)	4,5	160	0,9	32	1,8	64	1,8	64
Самостоятельная работа	5	148	1,2	44	1,4	52	1,4	52
Контактная самостоятельная работа	5	0,2	1,2	0,2	1,4	-	1,4	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		147,8		43,8		52		52
Вид контроля – Зачет			+	+	-	-	-	-
Вид контроля – Экзамен	2	72	-	-	1	36	1	36
Контактная работа промежуточная аттестация	2	0,8	-	-	1	0,4	1	0,4
Подготовка к экзамену.		71,2		-		35,6		35,6
Вид итогового контроля:			Зачёт		Экзамен		Экзамен	

Вид учебной работы	Семестр							
	Всего		1		2		3	
	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр.ч.	ЗЕ	Астр.ч.
Общая трудоемкость дисциплины	15	405	3	81	6	162	6	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	9	243	1,8	48,6	3,6	97,2	3,6	97,2
Лекции	4,5	121,5	0,9	24,3	1,8	48,6	1,8	48,6
Практические занятия (ПЗ)	4,5	121,5	0,9	24,3	1,8	4,6	1,8	4,6
Самостоятельная работа	4	108,6	1,2	33	1,4	37,8	1,4	37,8
Контактная самостоятельная работа	5	0,15	1,2	0,15	1,4	-	1,4	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		155,85		32,85		37,8		37,8
Вид контроля – Зачет			+	+	-	-	-	-
Вид контроля – Экзамен	2	54	-	-	1	27	1	27
Контактная работа промежуточная аттестация	2	0,6	-	-	1	0,3	1	0,3
Подготовка к экзамену.		53,4		-		26,7		26,7
Вид итогового контроля:			Зачёт		Экзамен		Экзамен	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Часов			
		Всего	Лекции	Практические занятия	Самостоятельная работа
1 СЕМЕСТР					
	Раздел 1. Элементы алгебры	22	8	8	6
1.1	Числовые множества, комплексные числа. Элементы векторной алгебры. Аналитическая геометрия на плоскости.	11	4	4	3
1.2	Матрицы. Теорема Кронекера - Капелли. Решение систем линейных алгебраических уравнений. Собственные числа и векторы матрицы. Квадратичные формы.	11	4	4	3
	Раздел 2. Функция одной переменной. Предел функции. Непрерывность функции.	26	8	8	10
2.1	Элементарные функции. Предел функции в точке и на бесконечности.	11	4	4	3
2.2	Бесконечно малые и бесконечно большие функции. Основные теоремы о пределах.	8	2	2	4
2.3	Непрерывность функции в точке и на промежутке.	7	2	2	3
	Раздел 3. Дифференциальное исчисление функции одной переменной.	50	16	16	18
3.1	Производная функции. Уравнения касательной и нормали.	12	4	4	4
3.2	Дифференциал функции. Производная сложной функции.	13	4	4	5
3.3	Основные теоремы дифференциального исчисления. Производные высших порядков.	12	4	4	4
3.4	Монотонность функции. Экстремум функции. Выпуклость, вогнутость и точки перегиба графика функции. Общая схема исследования функций и построение их графиков.	13	4	4	5
	ИТОГО	108	32	32	44
2 СЕМЕСТР					
	Раздел 4. Интегральное исчисление функции одной переменной.	72	28	28	16
4.1	Первообразная функции. Неопределенный интеграл и его	18	6	6	6

	свойства.				
4.2	Методы интегрирования.	34	14	14	6
4.3	Определенный интеграл, его геометрический смысл. Приложения определенного интеграла.	20	8	8	4
	Раздел 5. Дифференциальное исчисление функций нескольких переменных.	36	12	12	12
5.1	Функции двух и более переменных. Предел функции в точке. Частные производные. Дифференцируемость функции.	14	4	4	4
5.2	Дифференциал функции двух переменных, его инвариантность. Дифференцирование функции, заданной неявно.	14	4	4	4
5.3	Производная по направлению. Градиент и его свойства. Экстремумы функции двух переменных.	14	4	4	4
	Раздел 6. Кратные интегралы	36	12	12	12
6.1	Двойной интеграл. Вычисление двойного интеграла в декартовой системе координат.	14	4	4	4
6.2	Вычисление двойного интеграла в полярной системе координат. Интеграл Эйлера - Пуассона. Приложения двойного интеграла.	12	4	4	4
6.3	Тройной интеграл. Вычисление тройного интеграла. Приложения тройного интеграла.	12	4	4	4
	Раздел 7. Криволинейные и поверхностные интегралы.	36	12	12	12
7.1	Криволинейный интеграл по координатам. Приложения криволинейного интеграла.	12	4	4	4
7.2	Формула Грина для вычисления криволинейного интеграла по замкнутому контуру.	12	4	4	4
7.3	Поверхностный интеграл. Теорема Гаусса-Остроградского. Формула Стокса.	12	4	4	4
	ИТОГО	180	64	64	52
	Экзамен	36			
	ИТОГО	216	64	64	52
3 СЕМЕСТР					
	Раздел 8. Дифференциальные уравнения первого порядка.	27	16	16	13
8.1	Дифференциальные уравнения. Задача	9	6	6	5

	Коши. Дифференциальные уравнения (ДУ) с разделяющимися переменными.				
8.2	Однородные уравнения I-го порядка. Линейные уравнения I-го порядка. Уравнения Бернулли.	9	6	6	5
8.3	Дифференциальные уравнения в полных дифференциалах. Интегрирующий множитель.	9	4	4	3
	Раздел 9. Дифференциальные уравнения второго порядка.	27	16	16	12
9.1	Дифференциальные уравнения второго порядка, допускающие понижение порядка. Линейные однородные и неоднородные дифференциальные уравнения второго порядка (ЛОДУ и ЛНДУ).	7	4	4	3
9.2	Линейная независимость функций. Определитель Вронского и его свойства. Фундаментальная система ЛОДУ второго порядка.	7	4	4	3
9.3	ЛОДУ второго порядка с постоянными коэффициентами. ЛНДУ второго порядка с постоянными коэффициентами.	7	4	4	3
9.4	Линейные дифференциальные уравнения n -го порядка. Алгоритм построения общего решения.	6	4	4	3
	Раздел 10. Системы дифференциальных уравнений.	27	16	16	13
10.1	Системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка, решение методом исключения.	9	6	6	5
10.2	Системы ЛДУ первого порядка. Метод вариации произвольных постоянных, метод Эйлера. Создание математических моделей.	9	6	6	5
10.3	Системы линейных неоднородных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами.	9	4	4	3
	Раздел 11. Числовые и функциональные ряды.	27	16	16	14
11.1	Числовые ряды. Ряды Дирихле. Знакопередающийся ряд, признак Лейбница.	7	4	4	4
11.2	Функциональные ряды. Степенные ряды, теорема Абеля. Свойства степенных рядов.	7	4	4	4
11.3	Ряды Тейлора и Маклорена. Алгоритм разложения функции в ряд Маклорена.	7	4	4	3
11.4	Разложение функций в ряд Тейлора с	6	4	4	3

	помощью основных разложений. Применение степенных рядов.				
	ИТОГО	180	64	64	52
	Экзамен	36			
	ИТОГО	144	64	64	52

4.2. Содержание разделов дисциплины

1 СЕМЕСТР

Введение.

Предмет и методы математики. Описание основных разделов курса. Правила и требования при изучении курса.

Раздел 1. Элементы алгебры.

1.1.Числовые множества, комплексные числа. Определители II и III порядков. Векторы: основные понятия, скалярное, векторное и смешанное произведения векторов. Аналитическая геометрия: прямая на плоскости, кривые II порядка.

1.2.Матрицы: действия над матрицами, приведение к ступенчатому виду и виду Гаусса. Ранг матрицы. Обратная матрица. Теорема Кронекера-Капелли. Решение систем линейных алгебраических уравнений. Собственные числа и векторы. Квадратичные формы.

Раздел 2. Функция одной переменной. Предел функции. Непрерывность функции.

2.1.Функция. Способы задания функции. Предел функции в точке. Односторонние пределы. Пределы на бесконечности.

2.2.Бесконечно малые и бесконечно большие функции, их свойства и взаимная связь. Свойства пределов. Первый и второй замечательные пределы.

2.3.Непрерывность функции в точке и на промежутке. Свойства функций, непрерывных на отрезках. Точки разрыва функции и их классификация.

Раздел 3. Дифференциальное исчисление функции одной переменной.

3.1Производная функции, ее геометрический и механический смысл. Правила дифференцирования. Таблица основных производных.

3.2Дифференциал функции, его применения к приближенным вычислениям. Инвариантность формы первого дифференциала. Производная сложной функции. Дифференцируемость функции: определение, теоремы о связи дифференцируемости с непрерывностью и с существованием производной.

3.3.Основные теоремы дифференциального исчисления: Ролля, Лагранжа, Коши. Правило Лопиталья (раскрытие неопределенностей). Производные высших порядков. Локальный экстремум функции. Необходимые и достаточные условия экстремума.

3.4.Правило исследования функции на монотонность и экстремум. Признаки выпуклости и вогнутости функции. Точки перегиба. Необходимое и достаточное условия перегиба. Асимптоты функции, их виды и способы нахождения. Общая схема исследования функций, построение их графиков.

2 СЕМЕСТР

Раздел 4. Интегральное исчисление функции одной переменной.

4.1.Первообразная функция. Неопределенный интеграл и его свойства. Таблица основных интегралов.

4.2.Методы интегрирования: непосредственное интегрирование, интегрирование подстановкой, интегрирование по частям. Интегрирование рациональных дробей. Интегрирование некоторых иррациональных и тригонометрических функций.

4.3.Определенный интеграл, его геометрический смысл. Свойства определенного интеграла. Формула Ньютона-Лейбница. Теорема о среднем значении. Замена переменной и интегрирование по частям в определенном интеграле. Приложения определенного интеграла к вычислению площадей плоских фигур. Понятие несобственных интегралов: определения, свойства, методы вычисления.

Раздел 5. Дифференциальное исчисление функции нескольких переменных. Элементы теории поля.

5.1.Функции двух и более переменных: определение, область определения, область изменения, геометрическая интерпретация, линии уровня. Предел функции в точке. Частные производные (на примере функции двух переменных).

5.2.Дифференцируемость функции нескольких переменных. Достаточные условия дифференцируемости. Полная производная. Производная сложной функции. Полный дифференциал. Инвариантность полного дифференциала. Аналитический признак полного дифференциала. Дифференцирование функции одной и двух переменных, заданной неявно. Частные производные и полные дифференциалы высших порядков. Теорема о равенстве смешанных производных (для функции двух переменных). Локальные экстремумы функции двух переменных: необходимое и достаточное условия экстремума. Условный экстремум (метод множителей Лагранжа). Наибольшее и наименьшее значение функции в замкнутой области. Основные понятия теории поля. Скалярное поле. Поверхности и линии уровня.

5.3.Производная по направлению. Градиент скалярного поля и его свойства. Векторное поле. Дивергенция поля. Ротор поля. Связь между градиентом и производной по направлению.

Раздел 6. Кратные интегралы.

6.1.Двойной интеграл: определение, геометрический смысл, свойства.

6.2.Вычисление двойного интеграла в декартовой и полярной системах координат. Интеграл Пуассона. Тройной интеграл: определение, геометрический смысл, свойства.

6.3.Вычисление тройного интеграла. Приложения двойного и тройного интегралов.

Раздел 7. Криволинейные и поверхностные интегралы.

7.1.Криволинейный интеграл по координатам: определение, свойства, вычисление. Работа в силовом поле.

7.2.Формула Грина. Криволинейные интегралы, не зависящие от пути интегрирования. Потенциальная функция, потенциальное поле.

7.3.Понятие поверхностного интеграла. Поток вектора через поверхность. Теорема Гаусса-Остроградского. Формула Стокса.

3 СЕМЕСТР

Раздел 8. Дифференциальные уравнения первого порядка.

8.1.Дифференциальные уравнения: порядок, решение, теорема существования и единственности решения. Задача Коши. Уравнения с разделяющимися переменными. Однородные дифференциальные уравнения.

8.2.Линейные дифференциальные уравнения первого порядка.

8.3.Уравнения в полных дифференциалах. Интегрирующий множитель.

Раздел 9. Дифференциальные уравнения второго и n -го порядка.

9.1.Дифференциальные уравнения второго порядка, допускающие понижение порядка. Линейные дифференциальные уравнения второго порядка. Свойства решений.

9.2.Линейная независимость функций. Определитель Вронского. Структура общего решения линейного дифференциального уравнения второго порядка. Фундаментальная система решений.

9.3.Линейные однородные дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами: построение общего решения. Метод Эйлера. Линейные неоднородные дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами.

9.4.Общее и частное решения неоднородных уравнений. Линейные дифференциальные уравнения n -го порядка: свойства решений, теоремы о структуре общего решения, метод вариации постоянных. Линейные дифференциальные уравнения n -го порядка с постоянными коэффициентами. Алгоритм построения общего решения.

Раздел 10. Системы дифференциальных уравнений.

10.1.Системы дифференциальных уравнений первого порядка: общие понятия, теорема существования и единственности общего решения. Системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка: интегрирование методом исключения.

10.2.Системы линейных дифференциальных уравнений первого порядка: свойства решений, теоремы о структуре общего решения, метод вариации постоянных.

10.3.Системы линейных однородных и неоднородных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Элементы теории устойчивости. Методы численного решения дифференциальных уравнений.

Раздел 11. Числовые и функциональные ряды.

11.1.Числовые ряды: основные понятия, свойства сходящихся рядов, необходимый признак сходимости. Гармонический ряд. Ряды Дирихле. Признаки сравнения рядов с положительными членами. Признак Даламбера. Интегральный и радикальный признаки Коши. Знакопередающие ряды: признак Лейбница. Знакопеременные ряды: понятия абсолютной и условной сходимости, признак абсолютной сходимости, свойства абсолютно и условно сходящихся рядов.

11.2.Функциональные ряды: основные понятия, область сходимости. Степенные ряды: радиус, интервал, область сходимости. Свойства степенных рядов.

11.3.Ряды Тейлора и Маклорена: свойства, условие сходимости ряда к исходной функции, основные разложения. Разложение функции в ряд Маклорена с помощью основных разложений.

11.4.Главное значение функции. Эквивалентные функции. Применение рядов Тейлора и Маклорена для вычисления пределов.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

[illegible]

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1 семестр			
1.	1.1	Числовые множества, комплексные числа. Определители II и III порядков. Векторы: основные понятия, скалярное, векторное и смешанное произведение векторов. Аналитическая геометрия: прямая на плоскости, кривые II порядка.	4
2.	1.2	Матрицы: действия над матрицами, приведение к ступенчатому виду и виду Гаусса. Ранг матрицы. Обратная матрица. Теорема Кронекера-Капелли. Решение систем линейных алгебраических уравнений. Собственные числа и векторы. Квадратичные формы.	4
3.	2.1	Функция: область определения, чётность, нечётность, точки пересечения с осями координат. Элементарные функции, их свойства и графики.	4
4.	2.2 2.3	Вычисления пределов функций с помощью алгебраических преобразований. Вычисление пределов с помощью первого и второго замечательных пределов.	4
5.		Контрольная работа № 1	2
6.	3.1 3.2	Производная: определение, геометрический смысл. Правила дифференцирования. Таблица производных элементарных функций. Производная сложной функции и высшего порядка. Дифференциал функции.	4
7.	3.3	Вычисления пределов с помощью правила Лопиталя.	4
8.	3.4	Нахождения асимптот функции. Исследование функции на монотонность и экстремумы. Исследование функции на выпуклость, вогнутость, точки перегиба. Полное исследование функции и построение её графика.	4
9.		Контрольная работа № 2	2
ИТОГ			32

2 семестр			
1.	4.1	Таблица основных интегралов. Непосредственное интегрирование (табличное, введение под знак дифференциала, разложение).	4
2.	4.2	Интегрирование заменой и по частям. Интегрирование рациональных дробей.	4
3.	4.2	Интегрирование некоторых иррациональностей и тригонометрических функций.	4
4.	4.3	Определенный интеграл. Несобственные интегралы.	4
5.		Контрольная работа № 1	2
6.	5.1	Частные производные функции 2-х и 3-х переменных. Полный дифференциал функции 2-х переменных.	4
7.	5.1	Производные сложной функции. Полная производная. Дифференцирование функции, заданной неявно.	4
8.	5.2	Частные производные и дифференциалы высших порядков.	4
9.	5.2	Контрольная работа №2	2
10.		Производная по направлению и градиент. Экстремум	4

		функции 2-х переменных. Условный экстремум.	
11.	5.3	Двойной интеграл: переход к повторному интегралу, изменение порядка интегрирования. Примеры.	4
12.	6.1	Вычислить двойной интеграл в декартовой системе координат.	4
13.	6.1	Вычислить двойной интеграл в полярной системе координат. Приложения двойного интеграла.	4
14.	6.2 6.3	Контрольная работа №3	2
15.		Криволинейный интеграл по координатам (вычисление). Вычисление работы по перемещению материальной точки в силовом поле.	4
16.	7.1	Вычисление криволинейного интеграла по замкнутому контуру с помощью формулы Грина.	4
17.	7.2	Вычисление криволинейного интеграла, независимого от пути интегрирования (с помощью выбора оптимального пути или с помощью потенциальной функции).	4
18.	7.3	Контрольная работа №4	2
ИТОГ			64

3 семестр			
№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1.	8.1	Повторение интегрирования. Решение дифференциальных уравнений с разделяющимися переменными.	4
2.	8.1 8.2	Решение однородных дифференциальных уравнений I-го порядка.	4
	8.3	Решение линейных дифференциальных уравнений Бернулли.	4
3.	8.3	Уравнения в полных дифференциалах и допускающих интегрирующий множитель вида $\mu(x)$ и $\mu(y)$.	4
4.		Решение различных уравнений I-го порядка для подготовки к контрольной работе.	4
5.	9.1	Контрольная работа №1	2
6.	9.2	Решение дифференциальных уравнений II -го порядка, допускающих понижение порядка.	4
7.	9.3	Практическое занятие 6. Решение ЛОДУ II -го порядка с постоянными коэффициентами по методу Эйлера. Решение ЛНДУ II -го порядка с правой частью вида $P_n(x) \cdot e^{ax}$.	4
8.	9.4	Практическое занятие 7. Решение ЛНДУ II -го порядка с правой частью вида $e^{ax} \cdot (A \cos bx + B \sin bx)$.	4
9.	10.1 10.2	Практическое занятие 8. Метод вариации произвольных постоянных для ЛНДУ II -го порядка с постоянными коэффициентами.	4
10.		Практическое занятие 9.	4

		Решение систем линейных дифференциальных уравнений I-го порядка с постоянными коэффициентами. Метод исключения.	
11.	11.1	Метод Эйлера для однородных линейных систем, далее для неоднородной системы. Метод вариации произвольных постоянных.	6
12.	11.2	Контрольная работа №2	2
13.	11.3	Практическое занятие 10. Числовые ряды: основные понятия, общий член, частичная сумма, понятие сходимости ряда. Необходимый признак сходимости. Интегральный признак Коши.	4
14.	11.4	Практическое занятие 11. Исследование сходимости по признакам сравнения рядов и признаку Даламбера.	4
15.	11.	Практическое занятие 12. Исследование сходимости знакопеременяющихся рядов по признаку Лейбница. Абсолютная и условная сходимость рядов.	4
16.	11.	Практическое занятие 13. Степенной ряд, нахождение его области сходимости.	4
17.		Контрольная работа №3	2
ИТОГ			

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины «**Линейная алгебра и математический анализ**» предусмотрена самостоятельная работа студента бакалавриата в объеме **48** часов в **1** семестре, **44** часа во **2** семестре, **28** часов в **3** семестре, **44** часа в **4** семестре и **44** часа в **5** семестре. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **экзамена** (2 и 3 семестры), зачета с оценкой (1, 4, 5 семестры) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в учебной программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ

ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине в 1 семестре складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 100 баллов). Во 2 семестре за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *Экзамена* (максимальная оценка 40 баллов). В 3 семестре совокупная оценка складывается за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *Экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2 Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

1 СЕМЕСТР

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (1 семестр) составляет 100 баллов, по 50 баллов за каждую работу.

Раздел 1, 2. Примеры вариантов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 5 вопросов по 10 балла за вопрос.

Вариант 1.

- 1) Решить систему уравнений методом Крамера:
- $$\begin{cases} x + 2y + 3z = 5 \\ 2x - y - z = 1 \\ x + 3y + 4z = 6 \end{cases}$$
- 2) С помощью обратной матрицы A^{-1} решить матричное уравнение $AX=B$ и сделать проверку: $A = \begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 4 & -6 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$

Вычислить пределы:

3). $\lim_{x \rightarrow 1} \frac{2x^2 - 5x + 3}{\sqrt{x+8} - 3}$

4) $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos 6x}{1 - \cos 8x}$

5) $\lim_{x \rightarrow \infty} \left(\frac{x+5}{x+2} \right)^{3x}$

Вариант 2.

- 1) Даны вершины тетраэдра $ABCD$: $A(2; -1; 2)$, $B(1; 2; -1)$, $C(3; 2; 1)$, $D(-4; 2; 5)$. Найти объем тетраэдра и высоту, опущенную из вершины D .
- 2). Исследовать систему на совместность и найти ее общее решение методом Гаусса:

$$\begin{cases} 3x_1 - x_2 + x_4 = 4 \\ 2x_1 + x_2 - 3x_3 = 7 \\ x_1 - 2x_2 + 3x_3 + x_4 = -3 \\ 5x_1 - 3x_3 + x_4 = 11 \end{cases}$$

Вычислить пределы:

$$3) \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{6n^2 + 5n + 4}{3n^2 - 5n + 1}$$

$$4) \lim_{x \rightarrow 2} \frac{\sqrt{11-x} - \sqrt{7+x}}{3x^2 - 4x - 4}$$

$$5) \lim_{x \rightarrow \infty} \left(\frac{x+1}{x} \right)^{2-5x}$$

Вариант 3.

1) Даны векторы $\vec{a}=(-5; 8; 10)$, $\vec{b}=(-1; 6; 4)$; $\vec{c}=(-3; 4; -12)$. Найти проекцию вектора $\vec{d} = \vec{a} - \vec{b}$ на вектор $\vec{c}$.

2) С помощью обратной матрицы A^{-1} решить матричное уравнение $XA=B$ и сделать проверку: $A = \begin{pmatrix} -2 & 3 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} -4 & 7 \\ -7 & 11 \end{pmatrix}$.

Вычислить пределы:

$$3) \lim_{x \rightarrow 0} \frac{5x^2}{1 - \cos 3x}$$

$$4) \lim_{x \rightarrow 3} \frac{2x^2 - 3x - 9}{\sqrt{x^2 + 16} - 5}$$

$$5) \lim_{x \rightarrow 0} (1 + 3x)^{\frac{8}{x}}$$

Вариант 4.

1) Дан $\triangle ABC$: $A(28; 2)$; $B(4; -5)$; $C(0; -2)$. Составить уравнения AC , медианы из т.С и найти угол между ними.

2). Исследовать систему на совместность и найти ее общее решение методом Гаусса:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 - 2x_4 = 7 \\ 2x_1 + 3x_2 - x_4 = 5 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 + 4x_4 = -7 \end{cases}$$

Вычислить пределы:

$$3) \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{n^3 - 2n + 7}{3n^3 + n^2 - 1}$$

$$4) \lim_{x \rightarrow 4} \frac{2x^2 - 7x - 4}{\sqrt{9-2x} - \sqrt{5-x}}$$

$$5) \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin^3 2x}{5x^3}$$

Раздел 3. Примеры вариантов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 5 вопросов по 10 балла за вопрос.

Вариант 1

1. Найти $f'(x)$: $f(x) = \ln \frac{x^2 + 1}{3x} - \arctg \sqrt{1-x} + x \cdot 3^{\sin^2 x}$

2. Найти $y'(0)$, $y''(0)$ для $y = (2x^3 + 1) \cdot \cos x$

3.. $y = \frac{\sqrt{x} + \arctg x}{\cos x}$; $dy = ?$

4. Вычислить пределы по правилу Лопиталя:

а. $\lim_{x \rightarrow 2} \frac{\ln(x^2 - 3)}{x^2 - 3x + 2}$

б. $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{8^{3x} - 7^x}{\arcsin 3x - 5x^2}$

5. Показать, что функция $y = e^{-x} \sin 3x$ удовлетворяет дифференциальному уравнению $y'' + 2y' + 10y = 0$.

Вариант 2

1. Найти $f'(x)$: $f(x) = \operatorname{tg} 2x \cdot \ln \frac{1}{x} + \frac{\arcsin \sqrt{x}}{x} + 3x^2$

2. Найти $y'(1)$, $y''(1)$ для $y = \frac{\ln x}{x^3}$

3. Тело движется по закону: $x(t) = \frac{2t^3}{3} + \frac{t^2}{2} + 3t$ вдоль оси Ox . Найти скорость и ускорение в момент времени $t = 3$.

4. Вычислить пределы по правилу Лопиталя:

а. $\lim_{x \rightarrow \pi} \frac{\cos 3x - \cos x}{\operatorname{tg}^2 2x}$

б. $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{7^{2x} - 5^{3x}}{2x - \operatorname{arctg} 3x}$

5. Составить уравнение касательной к графику функции $y = 5x^2 - 2x + 3$, параллельной прямой $y = 5 - 12x$.

Вариант 3

1. Найти $f'(x)$: $f(x) = \log_2 \frac{\cos x}{x} - 3^{\arcsin \frac{1}{x}} + x \cdot \sin(2x - 3)$

2. Найти $y'(0)$, $y''(0)$ для $y = (4x + 3) \cdot e^{-x}$

3. $y = \frac{\frac{3}{\sqrt{2x}} - 3 \operatorname{arctg} 4x}{\ln(3x + 2)}$; $dy = ?$

4. Вычислить пределы по правилу Лопиталя:

а. $\lim_{x \rightarrow 2} \frac{\operatorname{arctg}(x^2 - 2x)}{\sin(3\pi x)}$

б. $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos 10x}{e^{x^2} - 1}$

5. Показать, что функция $y = 3e^{2x} \cdot \cos 5x$ удовлетворяет дифференциальному уравнению $y'' - 4y' + 29y = 0$.

Вариант 4

1. Найти $f'(x)$: $f(x) = x \cdot \ln \left(\operatorname{tg} \frac{x}{2} \right) - 3^{\cos \frac{\pi x}{2}} + \sqrt{\frac{x-1}{x+1}}$

2. Найти $y'(0)$, $y''(0)$ для $y = e^x \cdot \sin 2x$

3. Точка движется по прямой по закону: $S(t) = 5t^2 - 10t + 1$. Определить скорость и ускорение точки в момент времени $t = 2$.

4. Вычислить пределы по правилу Лопиталя:

а. $\lim_{x \rightarrow 3} \frac{2^{\sin \pi x} - 1}{\ln(x^3 - 6x - 8)}$

б. $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{4^x - 2^{7x}}{\operatorname{tg} 3x - x}$

5. В каких точках касательная к графику функции $y = x^3 - 12x^2 + 36x - 1$ параллельна оси Ox .

2 СЕМЕСТР

Для текущего контроля предусмотрено 4 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (2 семестр) составляет 20 баллов, по 10 баллов за каждую. Максимальная оценка за контрольные работы 3 и 4 (2 семестр) составляет 40 баллов, по 20 баллов за каждую работу

Раздел 4. Примеры вариантов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 5 вопросов по 2 балла за вопрос.

Вариант 1.

1. Найти интервалы возрастания, убывания и экстремумы функции $y = (2x + 1)e^{\frac{-x^2}{3}}$.

Вычислить интегралы:

2. $\int (3 - x) \sin \frac{x}{2} dx;$

3. $\int \cos^3 3x \cdot \sin^7 3x dx;$

4. $\int \frac{3x^2 + x - 6}{x^3 + 2x^2} dx;$

5. $\int_{-1}^7 \frac{5 - 2x}{\sqrt{x + 2}} dx.$

Вариант 2.

1. Найти интервалы возрастания, убывания и экстремумы функции $y = \frac{x^2 - 6x + 13}{x - 3}$.

Вычислить интегралы:

2. $\int (3x - 4) \cos 6x dx;$

3. $\int \cos^3 \frac{x}{2} \cdot \sin^6 \frac{x}{2} dx$

4. $\int \frac{x^2 - 3x - 7}{(x - 2)(x^2 + 5)} dx.$

5. $\int_{-1}^2 \frac{2x + 1}{\sqrt{x + 2}} dx$

Вариант 3.

1. Найти промежутки выпуклости, вогнутости и точки перегиба графика функции $y = \frac{x}{x^2 + 1}$.

Вычислить интегралы:

2. $\int (8x^3 - 6x^2 + x) \ln x dx;$

3. $\int \operatorname{ctg}^2 5x dx;$

$$4. \int \frac{5x^2 - 2x + 1}{(3x+1)(x^2+1)} dx.$$

$$5. \int_0^3 \frac{dx}{2 + \sqrt{x+1}}.$$

Вариант 4.

1. Найти асимптоты графика функции $y = \frac{x^3 - 3x}{x^2 - 1}.$

Вычислить интегралы:

2. $\int (2x+1)e^{4x} dx;$

3. $\int \cos^4 2x \cdot \sin^5 2x dx;$

4. $\int \frac{2x^2 + 3x - 12}{x^3 - 4x^2} dx.$

5. $\int_4^9 \frac{\sqrt{x}}{1 - \sqrt{x}} dx$

Раздел 5. Примеры вариантов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 5 вопросов по 2 балла за вопрос.

Вариант 1.

1. Найти dz если $z = \frac{\operatorname{tg}^3 3x}{\sqrt{y}}$

2. Найти $\frac{dz}{dx}$ если $z = \ln(e^x - e^y)$, где $y = \operatorname{ctg} 5x$.

3. Найти производную функции $u = \operatorname{arctg} \frac{xy}{z}$ в точке $M(1;2;2)$ в направлении идущем из точки M в точку $N(2;3;-3)$

4. Найти $\vec{grad} u$ в точке $M(1;0;-3)$ его длину и направление, если $u = \ln(x^2 + y^2) + xyz$

5. Найти экстремумы функции $z = -3x + xy - x^2 + 3y - y^2 + 1$

Вариант 2.

1. Найти du в точке $M(2;-1;2)$ если $u = \operatorname{arctg} \frac{y}{x} + zx$

2. Найти $\frac{\partial z}{\partial u}$ и $\frac{\partial z}{\partial v}$ если $z = x^2 \ln y$, где $x = \frac{u}{v}, y = 3u - 2v$.

3. Найти производную функции $u = \frac{\cos^2 y}{5x - 2z}$ в точке $M(1; \frac{\pi}{4}; 2)$ в направлении составляющем равные острые углы с осями координат.

4. Найти величину наибольшей скорости изменения функции $u = x^2 + 2y^2 + 3z^2 - 3x - 2y - 6z$ в точке $M(1;1;1)$.

5. Найти экстремумы функции $z = 6x - 4y - x^2 - y^2 + 10$

Вариант 3.

1. Найти dz если $z = \arctg \sqrt{x^y}$.
2. Найти $\frac{dz}{dx}$ если $z = \tg \frac{\sqrt{2y}}{x}$, где $y = 5^{-x}$.
3. Найти производную функции $u = \frac{3z}{x^2 + y^2 + z^2}$ в точке $M(1; -1; 1)$ в направлении вектора $2\vec{i} + \vec{j} - 2\vec{k}$.
4. Найти $\text{grad} u$ в точке $M(1; 1; -2)$ его длину и направление, если $u = \ln(2x + y) + x^3 y z^2$.
5. Найти экстремумы функции $z = x^2 + xy + y^2 - 6x - 9y$.

Вариант 4.

1. Найти dz если $z = \ln(y + \sqrt{x^2 + y})$.
2. Найти $\frac{\partial z}{\partial u}$ и $\frac{\partial z}{\partial v}$ если $z = \sin^2(2x + 3y)$, где $x = \frac{u+1}{v}$, $y = u \cos v$.
3. Найти производную функции $u = e^{3x - \sin \pi y}$ в точке $M(-1; 0)$ в направлении идущем из точки M в точку $N(3; 4)$.
4. Найти $\text{grad} u$ в точке $M(2; 2; 1)$ его длину и направление, если $u = \ln(x^2 + y^2 - z^2 + 1)$.
5. Найти экстремумы функции $z = 4x - 4y - x^2 - y^2$.

Раздел 6. Примеры вариантов к контрольной работе № 3 . Контрольная работа содержит 5 вопроса по 4 балла за вопрос.

Вариант 1

Изменить порядок интегрирования:

1. $\int_{-1}^1 dx \int_{-\sqrt{1-x^2}}^{1-x^2} f(x; y) dy$.
2. $\int_1^e dy \int_{\ln y}^{e+1-y} f(x, y) dx$

Вычислить:

3. $\iint_D (2x - y) dx dy$, $D: y = x^2; y = x; x = 2$.

$$4. \iint_D \left(1 + \frac{y^2}{x^2}\right) dx dy, \quad D: \quad x^2 + y^2 \geq \pi; x^2 + y^2 \leq 4\pi; y \geq 0; y \leq x.$$

$$5. \text{ Найти площадь области, ограниченной линиями: } x + y^2 = 1; \quad y + 2x + 1 = 0.$$

Вариант 2

Изменить порядок интегрирования:

$$1. \int_{-1}^1 dy \int_{y^2-1}^{1-y^2} f(x; y) dx.$$

$$2. \int_0^1 dx \int_{2x}^{\sqrt{5-x^2}} f(x, y) dy$$

Вычислить:

$$3. \iint_D (x - y) dx dy, \quad D: \quad y = 2 - x^2; y = 2x - 1; x \geq 0.$$

$$4. \iint_D \frac{dx dy}{x^2 + y^2 + 1}, \quad D: \quad x^2 + y^2 \leq 1; x \geq 0.$$

$$5. \text{ Найти площадь области, ограниченной линиями: } x + y = 1; \quad x - 1 = 0; \quad y = e^x.$$

Вариант 3

Изменить порядок интегрирования:

$$1. \int_0^1 dx \int_x^{2-x^2} f(x; y) dy.$$

$$2. \int_0^3 dy \int_4^{\sqrt{25-y^2}} f(x, y) dx$$

Вычислить:

$$3. \iint_D (x + 2y) dx dy, \quad D: \quad y = x; 2y = x; x = 2.$$

$$4. \iint_D (x^2 + y^2) dx dy, \quad D: \quad x^2 + y^2 \leq 2x.$$

$$5. \text{ Найти площадь области, ограниченной линиями: } y^2 = 1 + x; \quad y - x + 1 = 0.$$

Вариант 4

Изменить порядок интегрирования:

$$1. \int_0^2 dy \int_{2-y}^{4-y^2} f(x; y) dx$$

$$2. \int_0^1 dx \int_{-\sqrt{2x-x^2}}^{\sqrt{2x}} f(x, y) dy$$

Вычислить:

$$3. \iint_D (x + y) dx dy, \quad D: \quad y = x; y + x = 4; x = 0.$$

$$4. \iint_D \sqrt{x^2 + y^2} dx dy, \quad D: \quad x^2 + y^2 \geq 1; x^2 + y^2 \leq 4.$$

5. Найти площадь области, ограниченной линиями: $y = 2 - x^2$; $y = x$; $x \geq 0$.

Раздел 7. Примеры вариантов к контрольной работе № 4. Контрольная работа содержит 5 вопросов по 4 балла за вопрос.

Вариант 1

1. Вычислить: $\int_l (x^2 - y^2)dx + xydy$, если l : прямая АВ, А(1;1), В(3;4)
2. Вычислить по формуле Грина: $\oint_C xydx + y^2dy$, если $C: x^2 + y^2 = 4$
3. Вычислить: $\iint_D (x - y)dxdy$, если $D: x + y = 2; y = x; y = 0$
4. Вычислить по формуле Грина: $\oint_C x^2ydx - xy^2dy$, если $C: x^2 + y^2 = 1$
5. Вычислить: $\int_{(0;0)}^{(2;2)} (y^2 + 2xy)dx + (2xy + x^2)dy$

Вариант 2

1. Вычислить: $\int_l 2xydx - x^2dy$, если $l: x = 2y^2$ от точки О(0;0) до точки А(2;1)
2. Вычислить по формуле Грина: $\oint_C 2xydy - y^2dx$, если $C: x^2 + y^2 = R^2$
3. Вычислить: $\int_l \frac{dx}{y^2} + x^2dy$, если $l: y = \frac{1}{x}$ от точки А(1;1) до точки В(4;1/4)..
4. Вычислить по формуле Грина: $\oint_C x^3dx + xydy$, если $C: x^2 + y^2 = R^2$
5. Вычислить: $\int_{(1;2)}^{(3;4)} \frac{y}{x}dx + (y + \ln x)dy$

Вариант 3

1. Вычислить: $\int_l x^2dx + \frac{dy}{y^2}$, $l: y = \frac{1}{x}$ от точки А(1;1) до точки В(5;1/5)
2. Вычислить по формуле Грина: $\oint_C (x + 2y^3)dx + (3y^2 - y)dy$, если $C: x^2 + y^2 = 1$
3. Вычислить: $\int_l \cos^3 xdx + ydy$, если $l: y = \sin x$ от точки А(0;0) до точки $B\left(\frac{\pi}{2}; 1\right)$.
4. Вычислить по формуле Грина: $\oint_C (x + 2x^2)dx - (3x^3 + y)dy$, если $C: x^2 + y^2 = 4$

5. Вычислить: $\int_{(2;3)}^{(3;4)} (6xy^2 + 2x^3)dx + (6x^2y + 3y^2)dy$

3 СЕМЕСТР

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1, 2 и 3 (3 семестр) составляет 60 баллов, по 20 баллов за каждую работу.

Раздел 8. Примеры вариантов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 5 вопросов по 4 балла за вопрос.

Вариант № 1

- 1) $(\sqrt{xy} - x)dy + ydx = 0, y(1)=1$
- 2) $y' - y \operatorname{tg} x = \frac{1}{\cos^3 x}$
- 3) $(e^x \sin y + x)dx + (e^x \cos y + y)dy = 0$
- 4) $2x + 2xy^2 + \sqrt{2 - x^2} y' = 0$
- 5) $(1 - x^2 y)dx + x^2(y - x)dy = 0$

Вариант № 3

- 1) $xy' - y + \sqrt{x^2 + y^2} = 0, y(1) = 0$
- 2) $xy' + y - e^x = 0$
- 3) $\frac{3x^2}{\sqrt{y}} dx + \left(\ln y - \frac{x^3}{2\sqrt{y^3}} \right) dy = 0$
- 4) $(1 + e^x)yy' = e^x$
- 5) $(x^2 \cos x - y)dx + xdy = 0$

Вариант № 2

- 1) $y' = \frac{\frac{y}{xe^x} + y}{x}, y(1) = 0$
- 2) $y' - y \operatorname{tg} x = \frac{1}{\cos x}$
- 3) $\frac{y}{x} dx + (y^3 + \ln x) dy = 0$
- 4) $2xdx - ydy = yx^2 dy - xy^2 dx$
- 5) $(2e^x + y^4)dy - ye^x dx = 0$

Вариант № 4

- 1) $y' = \frac{x+y}{x-y}, y(1) = 0$
- 2) $xy'(x-1) + y = x^2(2x-1)$
- 3) $(x \cos 2y + 1)dx - x^2 \sin 2y dy = 0$
- 4) $3(x^2 y + y)dy + \sqrt{2 + y^2} dx = 0$
- 5) $(y + \ln x)dx - xdy = 0$

Раздел 9, 10. Примеры вариантов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 5 вопросов 4 балла за вопрос.

Вариант № 1

1. $4y^3 y'' = y^4 - 1; y(0) = \sqrt{2}; y'(0) = \frac{1}{2\sqrt{2}}.$
2. $y'' x \ln x = y'$
3. $y'' - 4y' + 4y = -e^{2x} \sin 6x$
4. $y'' - 2y' + y = e^x \ln x$

$$5. \begin{cases} x' = x - 3y, \\ y' = 3x + y. \end{cases}$$

Вариант № 2

$$1. y'' + 2 \sin y \cos^3 y = 0; y(0) = 0; y'(0) = 1$$

$$2. y'' - y' = 2x + 3;$$

$$3. y'' - 2y' + 2y = (6x - 11)e^{-x}$$

$$4. y'' + 4y = \frac{1}{\cos 2x}$$

$$5. \begin{cases} x' + x - 8y = 0, \\ y' - x - y = 0. \end{cases}$$

Вариант № 3

$$1. y'' \cdot y^3 + 49 = 0, y(3) = -7; y'(3) = -1.$$

$$2. y'' \cdot \operatorname{ctg} 2x + 2y' = 0$$

$$3. y'' + 2y' = 6e^x (\sin x + \cos x);$$

$$4. y'' - 2y' + y = 3e^x \sqrt{x-1}.$$

$$5. \begin{cases} x' = -7x + y, \\ y' = -5y - 2x. \end{cases}$$

Вариант № 4

$$1. y'' + 8 \sin y \cdot \cos^3 y = 0, y(0) = 0; y'(0) = 2.$$

$$2. y'' + \frac{2x}{x^2 + 1} y' = 2x$$

$$3. y'' + 3y' + 2y = (1 - 2x)e^{-x}$$

$$4. y'' + 16y = \operatorname{ctg} 4x$$

$$5. \begin{cases} x' = 2y - 3x, \\ y' = y - 2x. \end{cases}$$

Раздел 11. Примеры вариантов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 5 вопросов по 4 балла за вопрос.

Вариант 1.

Исследовать ряды на сходимость

$$1. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sqrt[4]{n^3}}{\sqrt{n^3 + 3}}.$$

$$2. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(3n+2) \cdot \ln^2(3n+2)}.$$

Исследовать на абсолютную и условную сходимость

$$3. \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{n}{(n+1)(n+2)(n+3)}.$$

$$4. \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{2n+1}{n^2+1}.$$

$$5. \text{ Найти область сходимости степенного ряда: } \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(x-7)^{2n}}{4^n \cdot \sqrt{n(n+1)}}$$

Вариант 2.

Исследовать ряды на сходимость

$$1. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4n-3}{\sqrt{2n^3+1}}.$$

$$2. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{10n+1}{(3n+2)!}.$$

Исследовать на абсолютную и условную сходимость

$$3. \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{2n+1}{2^n}.$$

$$4. \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{2}{n \ln n}.$$

$$5. \text{ Найти область сходимости степенного ряда } \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(x+5)^n}{(n+1) \cdot \ln(n+1)}$$

Вариант 3.

Исследовать ряды на сходимость

$$1. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4n+7}{3n^3+n}.$$

$$2. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(8n-3) \cdot \sqrt{\ln(8n-3)}}.$$

Исследовать на абсолютную и условную сходимость

$$3. \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{3n+2}{5^n}.$$

$$4. \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{5n+1}{\sqrt{4n^3+7}}.$$

$$5. \text{ Найти область сходимости степенного ряда } \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (x-3)^n}{5^n \cdot (n+1)}$$

Вариант 4.

Исследовать ряды на сходимость

$$1. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4^{n-1}}{5n-2}.$$

$$2. \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sqrt{\operatorname{arccotg}(3n+2)}}{1+(3n+2)^2}.$$

Исследовать на абсолютную и условную сходимость

$$3. \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{7n+3}{n(9n+2)}.$$

$$4. \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{\ln(n+1)}.$$

$$5. \text{ Найти область сходимости степенного ряда } \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(x+2)^n}{(4n+1) \cdot 4^n}$$

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр –зачет, 2 семестр – экзамен, 3 семестр – экзамен,)

Максимальное количество баллов за *экзамен* (2 семестр)– 40 баллов, за *экзамен* (3 семестр) – 40 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – зачёт)

Итоговый контроль по дисциплине не предусмотрен.

8.3.2. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – экзамен)

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 4 -7 рабочей программы дисциплины и содержит 8 вопросов, по 5 баллов за вопрос.

1. Первообразная. Неопределенный интеграл. Теорема об общем виде первообразных.
2. Основные свойства неопределенного интеграла.
3. Таблица основных интегралов.
4. Методы интегрирования: табличный, разложения.

5. Интегрирование подведением под знак дифференциала.
6. Интегрирование с помощью замены переменной.
7. Определенный интеграл: определение, свойства.
8. Формула Ньютона - Лейбница.
9. Вычисление определенного интеграла с помощью замены переменной.
10. Некоторые приложения определенного интеграла.
11. Интегралы с бесконечными пределами: определения, свойства.
12. Функции нескольких переменных: область определения, линии уровня, геометрическая интерпретация.
13. Предел функции в точке, частные производные первого и второго порядков функции нескольких переменных.
14. Частные производные первого порядка.
15. Частные производные второго порядка.
16. Полный дифференциал (для функции двух переменных).
17. Производная сложной функции.
18. Производная функции по направлению.
19. Градиент функции и его свойства.
20. Экстремумы функции двух переменных: необходимое и достаточное условия экстремума.
21. Условный экстремум (метод множителей Лагранжа).
22. Наибольшее и наименьшее значения функции в замкнутой области.

8.3.3. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен)

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 8 -11 рабочей программы дисциплины и содержит 8 вопросов, по 5 баллов за вопрос.

1. Дифференциальные уравнения: определения, порядок, решение, общее решение.
2. Примеры задач, приводящих к дифференциальным уравнениям.
3. Дифференциальные уравнения первого порядка с разделяющимися переменными.
4. Однородные дифференциальные уравнения первого порядка.
5. Линейные дифференциальные уравнения первого порядка.
6. Линейные дифференциальные уравнения второго порядка с переменными коэффициентами: свойства решений, структура общего решения.
7. Линейные однородные дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами (метод Эйлера).
8. Линейные неоднородные дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами (метод вариации).
9. Линейные неоднородные дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами. Метод подбора в случае правой части вида квазимногочлена.
10. Основные уравнения математической физики.
11. Числовые ряды: основные понятия, свойства сходящихся рядов.

12. Необходимый признак сходимости.
13. Гармонический ряд. Ряды Дирихле.
14. Признаки сравнения рядов с положительными членами.
15. Признак Даламбера.
16. Интегральный и радикальный признаки Коши.
17. Знакопередающие ряды: признак Лейбница.
18. Знакопеременные ряды: абсолютная и условная сходимости.
19. Признак абсолютной сходимости.
20. Свойства абсолютно и условно сходящихся рядов.
21. Степенные ряды: радиус, интервал, область сходимости.
22. Свойства степенных рядов.
23. Ряды Тейлора и Маклорена: свойства, основные разложения.
24. Разложение функции в ряд Маклорена с помощью основных разложений.
25. Ряды Фурье: определение, свойства.
26. Разложение периодической функции в ряд Фурье.
27. Разложение непериодической функции в ряд Фурье.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена

2 СЕМЕСТР

Экзамен по дисциплине «*Линейная алгебра и математический анализ*» проводится во 2 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 4 -7 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 8 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» Зав. Сколтеха _____ Травень В.Ф.. «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии»
Линейная алгебра и математический анализ	
БИЛЕТ № 1	
1. Теорема о производной сложной функции нескольких переменных (с док-вом).	
2. Формула для вычисления площади области D: $a \leq x \leq b, y_1(x) \leq y \leq y_2(x)$	
3. Найти $\frac{\partial z(A)}{\partial \bar{l}}$, если $z = (2x - 1)y^2 + \frac{y}{x}$, $\bar{l} = (3; 4)$, $A(1; 2)$	
4. Найти $\overline{grad}z(M)$, если $z = y^3 \sin 2x$, $M\left(\frac{\pi}{4}; 2\right)$	
5. Изменить порядок интегрирования: $\int_{-1}^0 dx \int_{-2x}^2 f(x; y) dy$	

6. Вычислить интеграл: $\iint_D (2-x) dx dy, D: y+x=2, y=x, x=2$.
7. Вычислить работу силы $\vec{F} = (2y-x)\vec{i} + (2y+x)\vec{j}$ при перемещении точки по прямой от точки A(0;3) до точки B(1;5).
8. Вычислить интеграл по формуле Грина: $\oint_C (5x+2xy)dx + (4y-2x^2)dy, C: x=0, y=1, y=x.$

«Утверждаю» Зав. Кафедрой высшей Сколтеха _____ Травень В.Ф.. «__» _____ 2021 г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени. Д. И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии»
Линейная алгебра и математический анализ	
БИЛЕТ № 2	
1. Теорема о среднем значении для двойного интеграла (с доказательством в вом).	
2. Дифференциал второго порядка функции $z = f(x, y)$.	
3. Найти полную производную $\frac{dz}{dt}$, если $z = \ln(e^{2t} + 4\sqrt{x} - \sin y)$ и $x = t \operatorname{tg} t, y = ct \operatorname{tg} t$.	
4. Найти $\frac{\partial z(A)}{\partial l}$, если $z = (2x-1)y^2 + \frac{y}{1+x}, \vec{l} = (3;4), A(1;2)$	
5. Изменить порядок интегрирования: $\int_0^1 dx \int_0^x f(x; y) dy + \int_1^2 dx \int_0^{2-x} f(x; y) dy$	
6. Вычислить интеграл: $\iint_D (x+1) dx dy, D: y+x=2, y=x, x=2$.	
7. Вычислить работу силы $\vec{F} = (3y-2x)\vec{i} + (x+2y)\vec{j}$ при перемещении точки вдоль дуги параболы $y = 5x - 2x^2 + 1$ от точки A(0;1) до точки B(1;4).	
8. Вычислить: $\int_{A(1;0)}^{B(3;2)} (6x-2y)dx + (3y-2x)dy$.	

3 СЕМЕСТР

Экзамен по дисциплине «*Линейная алгебра и математический анализ*» проводится в 3 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 8-11 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 8 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» Зав. Кафедрой Сколтеха	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет

_____ Травень В.Ф.. «__» _____ 20__ г.	имени. Д. И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
	Линейная алгебра и математический анализ
БИЛЕТ № 1 1. Построение общего решения ЛОДУ II-го порядка с постоянными коэффициентами в случае кратных корней характеристического уравнения (случай $D=0$) (с доказательством). 2. Сформулировать теорему существования и единственности решения ДУ I-го порядка. 3. Определение суммы и сходимости числового ряда. Перечислить свойства сходящихся рядов. 4. Решить дифференциальное уравнение: $(\cos y + y \cdot \sin x)dx + (2y - x \cdot \sin y - \cos x)dy = 0$ 5. Решить задачу Коши: $y'' \cdot \cos x = 2y' \cdot \sin x$, $y(0) = -1$; $y'(0) = 1$ 6. Решить дифференциальное уравнение: $5y'' - y' = 5 - 2x$ 7. Исследовать знакочередующийся ряд на абсолютную и условную сходимость: $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{4^n + 1}$ 8. Найти область сходимости степенного ряда: $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(x+1)^n}{\sqrt[3]{2n+1}}$	

«Утверждаю» Зав. Кафедрой Сколтеха _____ Травень В.Ф.. «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени. Д. И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
	Линейная алгебра и математический анализ
БИЛЕТ № 2 1. Знакопередающие ряды. Доказать признак Лейбница. 2. ДУ основные понятия: порядок, частное решение, общее решение, общий интеграл, задача Коши. 3. ДУ в полных дифференциалах. Формулировка аналитического признака полного дифференциала. 4. Решить дифференциальное уравнение: $xy' - y = x \cdot \operatorname{tg} \frac{y}{x}$ 5. Решить задачу Коши: $y'' \cdot y^3 + 1 = 0$, $y(0) = 1$, $y'(0) = 1$ 6. Решить дифференциальное уравнение: $y'' - 2y' + y = 2x(1 - x)$	

7. Исследовать числовой ряд на сходимость: $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{n+1}{7+3n}$

8. Найти область сходимости степенного ряда:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} \cdot (x-2)^n}{\sqrt{n+11}}$$

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ.

9.1. Рекомендуемая литература.

А) Основная литература:

1. «Сборник задач по высшей математике» (часть 1), Письменный Д.В., Лунгу К.Н. –М., изд. «Айрис», 2010 г. – 576 с.: ил. – (Высшее образование).
2. «Сборник задач по высшей математике» (часть 2), Письменный Д.В., Лунгу К.Н. –М., изд. «Айрис», 2010 г. – 592 с.: ил. – (Высшее образование).
3. «Конспект лекций по высшей математике», Письменный Д.В. –М., изд. «Айрис», 2010 г. – 608 с.: ил. – (Высшее образование).
4. Салимов Р.В. Математика для студентов строительных и технических специальностей: уч. пособие, Лань, 2018, 364 с.

Б) Дополнительная литература:

1. Дифференциальное и интегральное исчисление функции одной переменной. Рудаковская Е.Г., Рушайло М.Ф., Меладзе М.А., Гордеева Е.Л., Осипчик В.В. / Учебное пособие под ред. Рудаковской Е.Г., Рушайло М.Ф.: –М.: РХТУ им.Д.И.Менделеева, 2012. –108 с.
2. Дифференциальное и интегральное исчисление функции одной переменной (примеры и задачи). Рудаковская Е.Г., Аверина О.В., Воронов С.М., Старшова Т.Н., Хлынова Т.В., Ригер Т.В. /Учебное пособие под ред. Рудаковской Е.Г., –М.: РХТУ им.Д.И.Менделеева, 2013. –132 с.
3. Дифференциальное и интегральное исчисление функции многих переменных (теория и практика): учебное пособие / Е. Г. Рудаковская, Рушайло М.Ф., Шайкин А.Н., Меладзе М.А., Арсанукаев З.З., Воронов С.М. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2016. –120 с.
4. Обыкновенные дифференциальные уравнения: конспект лекций по высшей математике: учебное пособие / сост.: Е. М. Чечеткина, В. М. Азриэль, Е. Ю. Напеденина. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2012. – 64 с.
5. Обыкновенные дифференциальные уравнения и системы (примеры и задачи). Рудаковская Е.Г. Рушайло М.Ф., Хлынова Т.В., Ригер Т.В., Казанчян М.С., Ситин А.Г. /Учебное пособие под ред. Рудаковской Е.Г., Рушайло М.Ф., –М.: РХТУ им.Д.И.Менделеева, 2013. –116 с.
6. Ряды. Теория и практика. Рудаковская Е.Г., Арсанукаев З.З., Меладзе М.А., Напеденин Ю.Т. /Учебное пособие. –М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 2011. –72 с.
7. Дифференциальное и интегральное исчисление функции многих переменных. Рудаковская Е.Г., РушайлоМ.Ф., Напеденина Е.Ю., Меладзе М.А, Хлынова Т.В.

- /Учебное пособие под ред. Рудаковской Е.Г., Рушайло М.Ф.: –М.: РХТУ им.Д.И.Менделеева, 2012. –92 с.
8. Дифференциальное и интегральное исчисление функции многих переменных (примеры и задачи). Рудаковская Е.Г., Меладзе М.А, Хлынова Т.В., Шайкин А.Н., Ригер Т.В., /Учебное пособие под ред. Рудаковской Е.Г., Шайкина А.Н.: –М.: РХТУ им.Д.И.Менделеева, 2012. –108 с.
 9. Сборник расчетных работ по высшей математике. Том II. Обыкновенные дифференциальные уравнения и системы. Рудаковская Е.Г., Рушайло М.Ф., Осипчик В.В., Аверина О.А., Чечеткина Е.И., Напеденина Е.Ю., Напеденин Ю.Т., Иншакова К.А. /Учебное пособие в 3-х томах под ред. Рудаковской Е.Г.: –М.: РХТУ им.Д.И.Менделеева, 2016. –120 с.
 10. Сборник расчетных работ по высшей математике. Том III. Теория вероятностей и математическая статистика. Рудаковская Е.Г., Напеденина Е.Ю., Осипчик В.В., Напеденин Ю.Т., Орлова В.Л., Шайкин А.Н., Иншакова К.А. /Учебное пособие в 3-х томах под ред. Рудаковской Е.Г.: –М.: РХТУ им.Д.И.Менделеева, 2017. –124 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации.

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации.
- Комплекс обучающих программ.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://kvm.muctr.ru/> – сайт кафедры высшей математики.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ.

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине **«Линейная алгебра и математический анализ»** проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

13.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Аудитория с доской, компьютером, проектором и экраном.

13.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

13.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

13.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

13.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

14. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Формы и методы контроля и оценки результатов освоения разделов

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
1 семестр		
Раздел 1. Элементы алгебры. Аналитическая геометрия на плоскости.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата; – методами статистической обработки информации.	Оценка за контрольную работу № 1 (1 семестр)
Раздел 2. Функция одной переменной. Предел функции. Непрерывность функции.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия,	Оценка за контрольную работу № 1 (1 семестр)

	методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата; – методами статистической обработки информации.	
Раздел 3. Дифференциальное исчисление функции одной переменной.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	Оценка за контрольную работу № 2 (1 семестр) Оценка за экзамен
2 семестр		
Раздел 4. Интегральное исчисление функции одной переменной.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет:	Оценка за контрольную работу № 1 (1 семестр) Оценка на зачете

	– выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	
Раздел 5. Дифференциальное исчисление функций нескольких переменных.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	Оценка за контрольную работу № 2 (2 семестр) Оценка за экзамен
Раздел 6. Кратные интегралы	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет:	Оценка за контрольную работу № 3 (2 семестр) Оценка за экзамен

	– выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	
Раздел 7. Криволинейные и поверхностные интегралы.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	Оценка за контрольную работу № 4 (2 семестр) Оценка за экзамен
3 семестр		
Раздел 8. Дифференциальные уравнения первого порядка.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических	Оценка за контрольную работу № 1 (3 семестр) Оценка за экзамен

	моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	
Раздел 9. Дифференциальные уравнения второго порядка.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	Оценка за контрольную работу № 2 (3 семестр) Оценка за экзамен
Раздел 10. Системы дифференциальных уравнений.	Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических	Оценка за контрольную работу № 2 (3 семестр) Оценка за экзамен

	моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	
Раздел 11. Числовые и функциональные ряды.	Знает: Знает: – основы дифференциального и интегрального исчисления, дифференциальных уравнений – математические теории и методы, лежащие в основе построения математических моделей; – основы применения математических моделей и методов. Умеет: – выбирать математические методы, пригодные для решения конкретной задачи; – использовать математические понятия, методы и модели для описания различных процессов; – выявлять математические закономерности, лежащие в основе конкретных процессов; – использовать основные методы статистической обработки данных; – применять математические знания на междисциплинарном уровне. Владеет: – основами фундаментальных математических теорий и навыками использования математического аппарата;	Оценка за контрольную работу № 3 (3 семестр) Оценка за экзамен

15. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о Порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в Российском химико-технологическом университете имени Д.И. Менделеева (утв. решением Ученого совета университета от 28.06.2017, протокол № 9);

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины
«**Линейная алгебра и математический анализ**»
основной образовательной программы

04.03.01 «Химия»

Форма обучения: очная

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от «__» _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Материалы для технологий энергетики»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«____» _____ 2024г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена проф. Сколковского института науки и технологий к.х.н.
Федотовым С.С.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И.
Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Материалы для технологий энергетики»** относится к Обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области физической химии, квантовой химии.

Цель дисциплины – обобщение, закрепление и совершенствование знаний, умений и владений, обеспечивающих способность и готовность бакалавра в полной мере осуществлять научно-исследовательскую работу в области создания материалов для приложений в сфере энергетики.

Задачи дисциплины

– ознакомление с концепциями и достижениями современного материаловедения в области технологий энергетики, изучение подходов к созданию новых материалов.

– обобщение, закрепление и совершенствование знаний, умений и владений, обеспечивающих способность и готовность бакалавра в полной мере осуществлять научно-исследовательскую работу в области создания материалов для технологий энергетики.

Дисциплина **«Материалы для технологий энергетики»** преподается в 5 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
	ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- физическую суть процессов получения, передачи и преобразования энергии;
- принципы действия, конструкции, области применения и потенциальные возможности систем энергообеспечения;

Уметь:

- находить нестандартные решения профессиональных задач;

Владеть:

- современными методами и средствами исследования, проектирования систем энергообеспечения

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,2	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43,6	32,7
Вид итогового контроля:	зачёт с оц.		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1. Типы систем хранения и запасаения энергии	38	10	10	14
1.1	Обзор различных систем запасаения энергии	8	2	2	4
1.2	Классификация источников энергии	13	4	4	5
1.3	Современные системы энергообеспечения	13	4	4	5
2.	Раздел 2. Топливные элементы	21	6	6	9
2.1	Общий принцип работы топливных элементов	7	2	2	3
2.2	Классификация топливных элементов	7	2	2	3
2.3	Материалы катода и анода	7	2	2	3
3.	Раздел 3. Аккумуляторы-I	21	6	6	9
3.1	Сравнение первичных и перезаряжаемых химических источников тока	7	2	2	3
3.2	Никель-кадмиевые аккумуляторы	7	2	2	3
3.3	Примеры промышленных применений	7	2	2	3
4.	Раздел 4.Литий-ионные аккумуляторы	21	6	6	9
4.1	Сферы применений и основные ограничения	7	2	2	3
4.2	Способы получения материалов на основе слоистых оксидов переходных металлов	7	2	2	3
4.3	Методы исследования соединений	7	2	2	3
5	Раздел 5. Пост-ЛИА: натрий-калий-ионные, твердотельные аккумуляторы	11	4	4	3
5.1	Особенности твердотельных аккумуляторов	11	4	4	3
	ИТОГО	108	32	32	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Типы систем хранения и запасаения энергии.

Классификация источников энергии (тепло-, гидро-, атомная и альтернативные: био-, ветро-, солнечная, геотермальная). Современные системы энергообеспечения. Постановка задачи о целесообразности запасаения энергии. Обзор различных систем запасаения энергии: механических (гидроаккумулирующие станции, хранение энергии с использованием сжатого воздуха, маховичный накопитель энергии), термических (термоэлектрические генераторы), электрических (суперконденсаторы, системы с использованием явления сверхпроводимости), химических (свинец-кислотные, никель-металлгидридные, литий-ионные, «пост-литий-ионные», проточные аккумуляторы, технологии хранения водорода и природного газа, топливные элементы).

Раздел 2. Топливные элементы.

Общий принцип работы топливных элементов (ТЭ). Классификация топливных элементов. Низкотемпературные с полимерной мембраной (ПОМТЭ), прямые метанольные (ПМТЭ), щелочные (ЩТЭ). Среднетемпературные: фосфорно-кислотные (ФКТЭ). Высокотемпературные: расплавкарбонатные (РКТЭ), твердооксидные (ТОТЭ), протонкерамические ТЭ (ПКТЭ) как разновидность ТОТЭ. Особенности эксплуатации (топливо, температурный интервал, сфера применения, количество рабочих циклов) каждого из типов. Материалы катода и анода для низкотемпературных и среднетемпературных ТЭ (композиты платины с углеродом), подходы к получению соединений и композитов на их основе, методы нанесения покрытия. Общие закономерности твердофазного, золь-гель методов синтеза материалов. Материалы на основе металлического никеля и его соединений для РКТЭ. Применение в ТОТЭ и ПКТЭ оксидов редкоземельных элементов (методы синтеза, получение материалов с различной морфологией, методы нанесения электродов на поверхность токосъёмника): $Zr_{0.84}Y_{0.16}O_{1.92}$ (YSZ), Ni – YSZ, $La_{1-x}Sr_xMn_{3-\delta}$ (LSM). Симметричный ТОТЭ (С-ТОТЭ). Требования к материалам С-ТОТЭ. Поиск аналогов LSM, семейство перовскитов и перовскитоподобных соединений переходных металлов. Основные физико-химические процессы, протекающие в процессе работы ТОТЭ (диффузия газа, адсорбция, перенос электрона).

Раздел 3. Аккумуляторы-I.

Сравнение первичных и перезаряжаемых химических источников тока. Первые аккумуляторы – опыты Планте и Фора (IX век), Pb-кислотный аккумулятор. Первый «коммерческий» аккумулятор – Эдисон и Юнгер (1901 год). Современное развитие свинец-кислотных батарей, материалы положительного и отрицательного электродов, выбор электролита, эксплуатационные характеристики. Никель-кадмиевые аккумуляторы (Юнгер, 1899 год), развитие технологии в первой половине XX века, подходы к созданию электродов и материалов на основе кадмия, химические процессы, протекающие в процессе работы аккумулятора. Понятие об «эффекте памяти». Никель-металлогидридные аккумуляторы (NiMH) – история создания (1970-1980-ые) – альтернатива системам на основе кадмия. Методы получения материалов для NiMH-аккумуляторов, химические процессы, протекающие в процессе работы элемента. Примеры промышленных применений (Varta, Toyota, Sanyo и т.д.).

Раздел 4. Литий-ионные аккумуляторы.

Литий-ионные системы – сферы применений и основные ограничения. Обратимая де/интеркаляция лития в сульфиды переходных металлов. Открытие обратимое интеркаляции лития в графит, современная архитектура классического литий-ионного

аккумулятора (ЛИА). Способы получения материалов на основе слоистых оксидов переходных металлов (твёрдофазный, комбинированные с использованием соосаждения и т.д.). Оксоанионные соединения – аккумуляторы на основе литий-железо фосфата и других переходных металлов, подходы к получению оксо- и полианионных соединений переходных металлов как материалов для создания ЛИА. Методы исследования соединений, используемых в качестве материалов аккумуляторов. Химические процессы, протекающие в аккумуляторе в процессе работы, особенности получения сопутствующих соединений и материалов (материалы на основе боросиликатов, соли щелочных металлов и т.д.).

Раздел 5. Пост-ЛИА: натрий- калий-ионные, твердотельные аккумуляторы.

Пост-литий-ионные аккумуляторы: натрий-, калий- ионные (НИА, КИА). Сходства и различия с ЛИА, требования к материалам НИА, КИА и особенности их получения. Твердотельные аккумуляторы – принципиальные отличия от аккумуляторов «классической» архитектуры, физико-химические основы получения керамических материалов, обладающих катионной проводимостью, основные проблемы твердотельных систем.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5
	Знать:						
1	– физическую суть процессов получения, передачи и преобразования энергии;		+				
2	– принципы действия, конструкции, области применения и потенциальные возможности систем энергообеспечения			+	+	+	+
	Уметь:						
3	– находить нестандартные решения профессиональных задач;		+	+	+	+	+
	Владеть:						
4	– современными методами и средства исследования, проектирования систем энергообеспечения		+	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>							
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК					
9	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	+	+	+	+	+
10	ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	+	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Классификация источников энергии.	2
2	1	Походы к генерации энергии с пониженным углеродным следом.	2
3	1	Системы хранения энергии.	2
4	2	Топливные элементы: классификация, принцип работы.	2
5	2	Особенности эксплуатации высоко-, средне-температурных ТЭ.	2
6	2	Методы получения материалов для ТОТЭ.	2
7	2	Структурные особенности соединений структурного типа перовскита.	2
8	3	Классификация химических источников тока.	2
9	3	Материалы для первичных источников тока и методы их получения.	2
10	3	Материалы для свинец-кислотных, никель-кадмиевых и никель-металлгидридных элементов и методы их получения.	2
11	3	Способы и особенности синтеза материалов свинец-кислотных, никель-кадмиевых и никель-металлгидридных аккумуляторов в промышленности.	2
12	4	Основные особенности и принцип работы литий-ионного аккумулятора.	2
13	4	Способы синтеза материалов положительного электрода литий-ионных аккумуляторов: сульфиды и оксиды переходных металлов.	2
14	4	Способы синтеза материалов положительного электрода литий-ионных аккумуляторов: оксоанионные соединения переходных металлов.	2
15	4	Способы синтеза материалов положительного электрода литий-ионных аккумуляторов: полианионные соединения переходных металлов.	2
16	5	Основные задачи, решаемые при создании твердотельных аккумуляторов, способы получения проводящих многослойных керамических структур.	2

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторные занятия по дисциплине «*Материалы для технологий энергетики*» не предусмотрены.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

– ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;

- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **зачёта с оценкой** (5 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов), и итогового контроля в форме **зачёта с оценкой** (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы (5 семестр) составляет 20 баллов за каждую.

Раздел 1,2. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1. Приведите классификацию источников энергии, применяемых на данный момент в промышленности и быту.
2. Опишите принцип работы конденсатора и приведите пример их применений в различных областях техники.
3. Какие основные требования предъявляются к материалам, применяемых в конденсаторах. Приведите примеры нескольких соединений, используемых при создании материалов.
4. Опишите принцип работы гидроаккумулирующей электростанции. Назовите примеры материалов, которые используются при создании конструктивных элементов электростанции данного типа.
5. Опишите принцип работы атомной электростанции. Приведите классификацию атомных электростанций.
6. Напишите уравнение радиоактивного распада урана-235. Сформулируйте определение период полураспада. Приведите изотопный состав природного урана. Приведите примеры радиоактивных изотопов, применяемых в АЭС.
7. Напишите схемы химических процессов, применяемых в цикле ядерного топлива.
8. Опишите принцип работы топливного элемента. Приведите примеры соединений и материалов на их основе, применяемых в низкотемпературных топливных элементах.

Приведите примеры полимерных мембран, применяемых в ТОТЭ, предложите способы их получения.

9. Приведите примеры соединений, применяемых в высокотемпературных топливных элементах и методы их получения. Сформулируйте определение золь-гель процесса, а также приведите его схему.

10. Опишите процессы, протекающие в процессе работы высокотемпературного топливного элемента.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 баллов за вопрос.

1. Опишите основные достижения IX века в создании аккумуляторов. Приведите примеры более ранних опытов по созданию аккумуляторов.

2. Дайте объяснение термина первичный химический источник тока. Напишите уравнения химических реакций, протекающих в процессе работы первичного химического источника тока.

3. Приведите схемы химических реакций получения материалов для свинец-кислотных аккумуляторов. Обозначьте наиболее важные особенности получения такого рода материалов. Напишите уравнение химической реакции, протекающей в процессе работы свинец-кислотного аккумулятора. Укажите сферы применения аккумуляторов данного типа.

4. Опишите принцип работы и напишите уравнения химических реакций, протекающих в процессе работы никель-кадмиевого и никель-металлгидридного аккумулятора. Сравните два типа аккумуляторов, укажите основные недостатки, в том числе в сравнении со свинец-кислотными. Дайте определение понятия «эффект памяти» и его физикохимическое обоснование.

5. Дайте определение понятия «эффект памяти» и его физикохимическое обоснование.

6. Приведите примеры получения в промышленности и сфер применения никель-металлгидридных аккумуляторов.

7. Сравните характеристики (удельная и объёмная плотность, рабочее напряжение, количество рабочих циклов) свинец-кислотных, никель-кадмиевых, никель-металлгидридных аккумуляторов. Предложите оптимальные сферы применения для каждого из них.

8. Опишите основные экологические проблемы, возникающие при использовании аккумуляторов на основе никеля, свинца. Предложите химический способ утилизации использованных батарей, а также переработки и возвращения полезных вторичных материальных ресурсов в индустриальный цикл.

9. Сравните соединения, кристаллизующиеся в структурном типе минерала перовскита, применяемых в ТЭ и аккумуляторах.

10. Опишите процесс и приведите схемы химических реакций, протекающих при выделении сырья при производстве соединений редкоземельных элементов.

Разделы 4,5. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка 20 баллов. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 баллов за вопрос.

1. Предложите способ получения сульфидов переходных металлов, а также напишите уравнение реакций, протекающих в процессе работы литиевого элемента питания.

Укажите основные недостатки элементов питания на основе сульфидов.

2. Опишите принцип работы литий-ионного аккумулятора, назовите материалы, которые были использованы в первых коммерческих элементах (1990-ые годы). Приведите

описание вклада Джона Гуденафа, Стэнли Виттингхэма и Акира Ёсино в создание ЛИА (Нобелевская Премия 2019 года).

3. Опишите способы получения слоистых оксидов переходных металлов. Какие методы исследования необходимы для контроля качества получаемых материалов. Опишите механизм золь-гель процесса. Какие физико-химические закономерности используются в процессе получения малорастворимых соединений переходных металлов в качестве прекурсоров для получения материалов ЛИА.
4. Дайте определение понятию «индуктивный эффект». Приведите примеры получения литий-железо фосфата, LiFePO_4 и композитов на его основе. Приведите примеры семейств оксоанионных соединений, применяемых в современных ЛИА.
5. Сравните следующие классы материалов положительного электрода металл-ионных аккумуляторов: оксоанионные, полианионные соединения переходных металлов.
6. Приведите примеры солей щелочных металлов, а также органических соединений, применяемых для создания электролитов литий-, металл-ионных аккумуляторов.
7. Дайте определение термину ионная проводимость. Сравните ионные проводимости жидких электролитов и некоторых твердотельных электролитов ($\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ и т.д.). Приведите возможные схемы синтеза оксидов, используемых в качестве электролитов твердотельных аккумуляторов.
8. Опишите основные задачи, решаемые при переходе от литий-ионных к натрий-, калий-ионным системам. Стабилизация каких структурных типов возможна для соединений натрия и калия (в сравнении с соединениями лития).
9. Опишите и приведите методы получения материалов на основе углерода для применения в сфере металл-ионных аккумуляторов.
10. Дайте определение следующим понятиям: сплав, твёрдый раствор. Опишите примеры применения сплавов в натрий-ионных аккумуляторах.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (5 семестр – зачёт с оценкой).

Билет для зачёта включает контрольные вопросы по разделам 1-5 рабочей программы дисциплины и содержит 4 вопроса.

1 и 2 вопрос – по 8 баллов, 3 и вопрос – по 12 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (5 семестр – зачёт с оценкой).

1. Какие основные требования предъявляются к материалам, применяемых в конденсаторах. Приведите примеры нескольких соединений, используемых при создании материалов.
2. Опишите принцип работы топливного элемента. Приведите примеры соединений и материалов на их основе, применяемых в низкотемпературных топливных элементах. Приведите примеры полимерных мембран, применяемых в ТОТЭ, предложите способы их получения.
3. Сравните характеристики (удельная и объёмная плотность, рабочее напряжение, количество рабочих циклов) свинец-кислотных, никель-кадмиевых, никель-металлгидридных аккумуляторов. Предложите оптимальные сферы применения для каждого из них.
4. Классифицируйте современные методы генерации энергии. Опишите основные преимущества и недостатки каждого из них. Дайте оценку на качественном уровне экологической нагрузки на локальный биогеоценоз при строительстве и эксплуатации ГЭС, ТЭЦ, АЭС и т.д.

- 5.Опишите с приведением химических реакций замкнутый ядерный цикл. Дайте определение терминам «радиоактивный распад», «период полураспада».
- 6.Опишите принцип работы ТЭЦ и приведите примеры различных видов топлив, используемых в ТЭЦ на данный момент.
- 7.Напишите уравнение, определяющее ёмкость конденсатора. Опишите устройство конденсатора.
- 8.Опишите принцип работы системы хранения энергии на основе сжатого воздуха, запасаения теплоты.
- 9.Приведите примеры сталей, композитов, бетонов, применяемых при создании ГЭС, приливных, геотермальных электростанций.
- 10.Дайте определение понятию «химический источник тока». Сравните конденсатор, первичный химический источник тока и аккумулятор. Дайте определение понятию «фарадеевский процесс».
- 11.Какие существуют системы запасаения энергии, в которых реализуются особые физические свойства соединений и материалов на их основе (например, системы, использующие явление сверхпроводимости). Опишите основные известные на данный момент классы сверхпроводников. Приведите схему получения сверхпроводящих керамик на основе оксидов иттрия-бария-меди ($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$).
- 12.Нарисуйте схему гальванического элемента. Укажите, какие соединения были использованы в первых гальванических элементах.
- 13.Укажите, соединения каких металлов имеют особое значения для получения материалов для топливных элементов. Опишите промышленный цикл выделения редкоземельных элементов с приведением химических реакций.
- 14.Опишите структурный тип минерала перовскита. Приведите примеры соединений, кристаллизующихся в данном структурном типе, которые применяются в топливных элементах, аккумуляторах.
15. Приведите примеры соединений, применяемых в высокотемпературных топливных элементах и методы их получения. Сформулируйте определение золь-гель процесса, а также приведите его схему.
- 16.Сравните возможности получения материалов твердофазным, золь-гель методами. Опишите особенности и приведите пример использования метода Печини для получения материалов аккумуляторов, топливных элементов.
- 17.Дайте определение понятия «полимерная мембрана топливного элемента». Приведите примеры полимерных мембран (нафион и т.д.).
- 18.Опишите методы получения соединений никеля, кадмия, а также гидридов металлов для создания никель-кадмиевых и никель-металлгидридных аккумуляторов.
- 19.Опишите с приведением схем химических реакций методов получения слоистых оксидов переходных металлов для применения в качестве положительных электродов литий-ионных аккумуляторов.
- 20.Опишите основные ресурсы кобальта, никеля, меди, лития. Приведите схему получения соединения, никеля, меди, кобальта и лития для создания материалов электродов аккумуляторов.
- 21.Индуктивный эффект оксо- и поли- анионных групп и его использованием для получения материалов электродов аккумуляторов с заданными характеристиками. Закон Фарадея – определение ёмкости материала.
- 22.Материалы на основе графита и различных видах углерода для применения в качестве отрицательного электрода аккумулятора – методы получения, особенности эксплуатации.
- 23.Методы получения особо чистых солей щелочных металлов для создания электролитов металл-ионных аккумуляторов. Приведите основные классы соединений, методы их получения и особенности синтеза.

24. Методы получения боросиликатных соединений для создания сепараторов классических литий-ионных аккумуляторов. Приведите схему процесса с указанием химических реакций.
25. Особенности получения соединений лития. Укажите основные месторождения соединений лития, укажите основные достоинства и недостатки каждого из них.
26. Опишите методы получения органических соединений, применяемых при создании электролитов металл-ионных аккумуляторов.
27. Приведите описание вклада Джона Гуденафа, Стэнли Виттингхэма и Акира Ёсино в создание ЛИА (Нобелевская Премия 2019 года).
28. Опишите способы получения слоистых оксидов переходных металлов. Какие методы исследования необходимы для контроля качества получаемых материалов. Опишите механизм золь-гель процесса. Какие физико-химические закономерности используются в процессе получения малорастворимых соединений переходных металлов в качестве прекурсоров для получения материалов ЛИА.
29. Укажите основные месторождения редкоземельных металлов, применяемых при создании керамик, обладающих проводимостью по ионам щелочных металлов, например, лития. Напишите уравнения химических реакций, протекающих в процессе выделения соединений иттрия, галлия, циркония.
30. Опишите основные стадии взаимодействия иона щелочного металла с материалом электрода в процессе заряда/разряда металл-ионного аккумулятора.
31. Опишите технологическую схему получения металлического алюминия, приведите уравнения реакций. Дайте объяснение возможности отказа от алюминиевого токосъёмника при переходе от ЛИА к натрий-ионному аккумулятору. Укажите побочные процессы, протекающие в результате электролиза расплавов соединений алюминия.
32. Какие методы «мягкой химии» (“chimie douce”) применяются при синтезе материалов ТЭ, аккумуляторов.
33. Дайте определения понятиям «коллоидная (дисперсная) система», «золь», «гель». Опишите подходы к созданию дисперсных материалов золь-гель методом.
34. Опишите процесс получения соединений фосфора в промышленности. Приведите химические реакции. Приведите примеры крупных месторождений фосфора. Напишите химические реакции, соответствующие синтезу материалов положительного электрода аккумулятора со структурой минерала трифилита (LiFePO_4). Опишите кристаллическую структуру соединений, кристаллизующихся в данном структурном типе.
35. Напишите схему реакций, протекающих при синтезе методами «мягкой химии» соединений со структурой трифилита (LiFePO_4 , NaFePO_4). Дайте объяснение почему синтез NaFePO_4 твердофазным методом приводит к образованию соединения со структурой минерала марицита.
36. Приведите несколько примеров использования органических и высокомолекулярных соединений для создания проводящих покрытий материалов электродов аккумуляторов.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (5 семестр).

Зчёт с оценкой по дисциплине «**Материалы для технологий энергетики**» проводится в 5 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-5 рабочей программы дисциплины. Билет для *зачёта* состоит из 4 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для *вид контроля из УП*:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Материалы для технологий энергетики	
Билет № 1 1.Напишите уравнение, определяющее ёмкость конденсатора. Опишите устройство конденсатора. 2.Приведите описание вклада Джона Гуденафа, Стэнли Виттингхэма и Акира Ёсино в создание ЛИА (Нобелевская Премия 2019 года). 3.Опишите способы получения слоистых оксидов переходных металлов. Какие методы исследования необходимы для контроля качества получаемых материалов. Опишите механизм золь-гель процесса. Какие физико-химические закономерности используются в процессе получения малорастворимых соединений переходных металлов в качестве прекурсоров для получения материалов ЛИА. 4.Индуктивный эффект оксо- и поли- анионных групп и его использованием для получения материалов электродов аккумуляторов с заданными характеристиками. Закон Фарадея – определение ёмкости материала.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Химия твердого тела учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений А.В.Кнотько, И.А.Пресняков, Ю.Д.Третьяков – Москва: Издательский центр "Академия", 2006 год
2. Электрохимия: учебное пособие для вузов / Мир химии – Ф. Миомандр и др.; пер. с фр. В.Н. Грасевич; под ред. Ю.Д. Гамбурга. – Москва, Техносфера, 2008 год

Б. Дополнительная литература

1. Electrochemical methods. Fundamentals and applications – A. J. Bard, L. R. Faulkner- John Wiley & Sons, INC, 2001 год
2. Comprehensive Inorganic Chemistry II: From Elements to Applications 2nd Edition, Kindle Edition – Jan Reedijk (editor), Kenneth R. Poeppelmeier (Editor), Elsevier, 2013 год
3. Физикохимия поверхности В. И. Ролдугин – Москва: Интеллект, 2011 год

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Nature Sustainability» ISSN 2398-9629
- Журнал «Journal power sources» ISSN 03787753
- Журнал «Solid State Chemistry» ISSN 00224596, 1095726X
- Журнал «Chemistry of materials» ISSN 08974756, 15205002
- Журнал «Успехи Химии» ISSN 0042-1308, 1817-5651
- Журнал «Chemical reviews» ISSN 00092665, 15206890

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <https://www.nature.com/natsustain>
- <https://www.uspkhim.ru>
- <https://energypolicy.ru>
- <https://energy.skolkovo.ru/en/senec/research/>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

- сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Материалы для технологий энергетики»* проводятся в форме лекционных, семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;
Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Типы систем хранения и запасания энергии	<i>Знает:</i> – физическую суть процессов получения, передачи и преобразования энергии; <i>Умеет:</i> – находить нестандартные решения профессиональных задач; <i>Владеет:</i> – современными методами и средствами исследования, проектирования систем энергообеспечения	Оценка за контрольную работу №1 (5 семестр) Оценка за <i>зачёт с оценкой</i> (5 семестр)
Раздел 2. Топливные элементы	<i>Знает:</i> – принципы действия, конструкции, области применения и потенциальные возможности систем энергообеспечения; <i>Умеет:</i> – находить нестандартные решения профессиональных задач; <i>Владеет:</i> – современными методами и средствами исследования, проектирования систем энергообеспечения	Оценка за контрольную работу №1 (5 семестр) Оценка за <i>зачёт с оценкой</i> (5 семестр)
Раздел 3. Аккумуляторы-I	<i>Знает:</i> – принципы действия, конструкции, области применения и потенциальные возможности систем энергообеспечения; <i>Умеет:</i> – находить нестандартные решения профессиональных задач; <i>Владеет:</i> – современными методами и средствами исследования, проектирования систем энергообеспечения	Оценка за контрольную работу №2 (5 семестр) Оценка за <i>зачёт с оценкой</i> (5 семестр)

Раздел 4. Литий-ионные аккумуляторы	<i>Знает:</i> – принципы действия, конструкции, области применения и потенциальные возможности систем энергообеспечения; <i>Умеет:</i> – находить нестандартные решения профессиональных задач; <i>Владеет:</i> – современными методами и средствами исследования, проектирования систем энергообеспечения	Оценка за контрольную работу №3 (5 семестр) Оценка за <i>зачёт с оценкой</i> (5 семестр)
Раздел 5. Пост-ЛИА: натрий-калий-ионные, твердотельные аккумуляторы	<i>Знает:</i> – принципы действия, конструкции, области применения и потенциальные возможности систем энергообеспечения; <i>Умеет:</i> – находить нестандартные решения профессиональных задач; <i>Владеет:</i> современными методами и средствами исследования, проектирования систем энергообеспечения	Оценка за контрольную работу №3 (5 семестр) Оценка за <i>зачёт с оценкой</i> (5 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Молекулярная электроника»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена д.х.н., профессором, зав. кафедрой Сколтех В.Ф. Травенем.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтех РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой кафедры Сколтеха *«Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии»* РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра семестров.

Дисциплина «Молекулярная электроника» относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области физической химии, в том числе в области кристаллохимии, химической термодинамики и строения вещества.

Цель дисциплины состоит в приобретении студентами знаний, умений, владений и в формировании компетенций в области материаловедения и, в частности, в области дизайна, создания и исследования новых функциональных материалов.

Задачи дисциплины

- развитие у обучающихся системных углубленных знаний в области науки о материалах;
- формирование понимания взаимосвязи состава/строения и свойств материала;
- углубление представлений о типах современных материалов и подходах к выбору и дизайну материалов для конкретных прикладных задач

Дисциплина «*Молекулярная электроника*» преподается в 7 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономичных и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами
			ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	
			ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для изучения реакционной способности органических и гибридных материалов.	

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные закономерности электронного строения твердых тел на нано-, микро- и макроуровне;
- важнейшие типы современных материалов, их свойства и область применения;
- основные характеристики электронной структуры различных типов материалов и их влияние на свойства получаемого материала;
- методы исследования электронного строения молекул и материала и прогнозирования его работоспособности в заданных условиях эксплуатации;

Уметь:

- использовать полученные знания о взаимосвязи состава/электронной структуры материала с его свойствами для решения задач дизайна материалов с заданными свойствами;
- оценивать перспективы использования материала для решения различных задач промышленности;
- применять современные научно-технические достижения для решения проблем наук о материалах и смежных наук.

Владеть:

- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области материаловедения;
- методологическими подходами к изучению электронной структуры материалов;
- способностью генерировать новые идеи при решении практических задач в области наук о материалах.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3.6	128	96
Лекции	1.8	64	48
Практические занятия (ПЗ)	1.8	64	48
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1.4	52	39
Контактная самостоятельная работа	1.4	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		52	39
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0.4	0.3
Подготовка к экзамену.		35.6	26.7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1. 1 Электронная структура органических материалов на молекулярном уровне.	153	54	54	45
1.1	Введение	5	2	2	1
1.2	Электронная структура органических материалов на молекулярном уровне	28	10	10	8
1.3	Экспериментальные методы изучения электронной структура органических молекул и материалов.	28	10	10	8
1.4	Электронная спектроскопия поглощения и испускания	23	8	8	7
1.5	Полярография	23	8	8	7
1.6	Метод электронного парамагнитного резонанса	23	8	8	7
1.7	Граничные электронные уровни молекул.	23	8	8	7
2.	«Работа» электронной структуры в материалах генерации, преобразования и сохранения энергии.	27	10	10	7
2.1	Фотовольтаические ячейки.	11	4	4	3
2.2	Фотохимические реакции для запасания энергии	11	4	4	3
2.3	Заключение	5	2	2	1
	ИТОГО	180	64	64	52
	Экзамен (если предусмотрен УП)	36			
	ИТОГО	216			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1 Электронная структура органических материалов на молекулярном уровне.

1.1. Введение.

Место дисциплины «Электронная структура органических молекул и материалов» среди наук о материалах в плеяде естественнонаучных дисциплин. Электронная структура органических молекул в терминах молекулярных орбиталей и электронных уровней - основа функционирования органических соединений и органо-гибридных конъюгатов в современных материалах молекулярной электроники и фотоники. Задачи и методы дисциплины. Роль параметров электронной структуры органических молекул и материалов в формировании их функциональных свойств. Перспективы дизайна «умных» материалов.

1.2. Электронная структура органических материалов на молекулярном уровне.

Методы расчета электронной структуры молекул и материалов. Квантовая механика - основа современной интерпретация природы химической связи в органических и органо-гибридных материалах. Методы расчета электронной структуры молекул и материалов включают применение как полуэмпирических, так и неэмпирических подходов. Наиболее распространенный современный способ расчета молекулярных свойств основан на теории функционала плотности (DFT), которая фокусируется на общей электронной плотности молекулы. При этом применяются различные приближения, откалиброванные путем сравнения экспериментальных данных с результатами расчетов методами МО. B3LYP - наиболее широко применяемый из многих возможных обменных и корреляционных функционалов. 6-31G* и 6-31G** - обычно используемые базисные наборы. Применение вычислений DFT для значительно больших молекул, чем наиболее точные методы *ab initio*. Применение методов DFT для теоретического обоснования таких важных химических понятий, как электроотрицательность, жесткость/мягкость электронной оболочки, для анализа спектральных свойств молекул и материалов

1.3. Экспериментальные методы изучения электронной структура органических молекул и материалов.

Фотоэлектронная спектроскопия – основной метод оценки уровней энергии электронов в органических молекулах. Фотоэлектронная спектроскопия в газовой фазе дает информацию о занятых электронных уровнях, в том числе и о высшей занятой молекулярной орбитали органической молекулы. Информация о высших занятых молекулярных орбиталях из результатов изучения положения полос с переносом заряда в электронных абсорбционных спектрах соответствующих комплексов органических субстратов с п-акцепторами.

Информация о вакантных электронных уровнях органических молекул из данных электронной трансмиссионной спектроскопии в газовой фазе. Сопоставление данных об энергиях занятых и вакантных уровнях - информация о параметрах электронных щелей, определяющих параметры электронных переходов как внутри электронной оболочки молекулы, так и в межмолекулярных взаимодействиях. Применение параметров граничных электронных уровней органических соединений для дизайна материалов солнечной энергетики.

1.4. Электронная спектроскопия поглощения и испускания

(флуоресцентная спектроскопия) о природе и структуре возбужденных состояний молекул., Анализ природы полос поглощения и испускания - источник информации о взаимодействии отдельных фрагментов в молекулах и конъюгатах. которые вносят определяющий вклад в распределение электронной плотности как в основном, так и в возбужденном состояниях соответствующих структур.

1.5.Полярография –

метод измерения энергий занятых и вакантных энергетических уровней органических молекул в условиях ассоциации, в частности, в жидкой фазе. Оценки влияния сольватации на электронную структуру сложных органических молекул и их ион-радикалов при их переходе от индивидуального состояния в газовой фазе к сольватированному состоянию в жидкой фазе. Обратимые электрохимические процессы - циклическая вольтамперометрия,

1.6.Метод электронного парамагнитного резонанса.

Оценки распределения спиновой плотности в ион-радикалах органических молекул. Роль ион-радикалов в аккумуляции солнечной энергии.

1.7. Граничные электронные уровни молекул. Влияние самоассоциации и среды на электронную структуру.

Эффекты самоассоциации - причина значительные смещения характеристических частот в ИК-спектрах. Эффективный дипольный момент как следствие взаимодействия дипольных моментов молекул растворителя и растворенного вещества. Изменение химического сдвига в спектрах ЯМР растворенного вещества вследствие дополнительного экранирования магнитно-активного ядра (например, протона) полем растворителя. Энергетика процессов ассоциации и сольватации в рамках различных подходов. Энергия электростатического взаимодействия растворенной молекулы с растворителем; энергия кавитации - энергия образования полости, в которую помещается растворенная молекула; энергия дисперсионного взаимодействия; энергия отталкивания валентно-несвязанных атомов – составляющие макроскопического подхода. Квантово-химические расчеты совокупности молекул, рассматриваемых как единая система (супермолекула) – основа супермолекулярных (или дискретных) подходов. Независимость распределение электронной плотности на занятых МО от ассоциации органических молекул (на примере аммиака, бензола, уксусной кислоты).

Раздел 2. «Работа» электронной структуры в материалах генерации, преобразования и сохранения энергии.

2.1.Фотовольтаические ячейки.

Органические и гибридные солнечные батареи. Устройство элементарной солнечной ячейки. Основные процессы, протекающие в солнечной ячейке: поглощение солнечного света, сопровождаемое генерацией электронов и зарядов, разделение разноименных зарядов, транспорт зарядов, сбор зарядов на катоде и аноде. Генерация зарядов в фоточувствительном слое совместной работой двух структур – донора D и акцептора A. Особая роль структуры донора - способность поглощать излучение в максимально широком диапазоне видимого спектра, поглощать максимальное количество энергии солнечного света. Полициклические гетероароматические соединения, обладающие развитой π -электронной структурой – эффективные доноры электронов. Роль структуры акцептора электронов. Возбужденные состояния D^* и A^* (экситоны)- Основные

параметры, определяющими эффективность солнечных ячеек: напряжение холостого хода V_{xx} , ток короткого замыкания J_{xz} и фактор заполнения Φ_3 . Зависимость плотности тока короткого замыкания – J_{xz} при нулевом приложенном потенциале от числа фотонов, поглощенных активным слоем ячейки. Зависимость фактора заполнения фотовольтаической ячейки Φ_3 от зарядово-транспортных характеристик компонентов фотоактивного слоя и эффективности переноса заряда на границах раздела между фотоактивным слоем и электродами. Особая роль правильного подбора уровней энергий граничных орбиталей структур D и A. Примеры формирования и функционирования эффективных солнечных ячеек.

2.2. Фотохимические реакции для запасаания энергии.

Роль электроциклических органических реакций, сопровождаемых образованием пространственно-напряженных структур, в аккумулировании солнечной энергии. Регенерация солнечной энергии в ретро-электроциклической реакции в термических условиях. Дизайн полиенов, поглощающих в длинноволновой области спектра, Примеры фотохимических реакций для запасаания энергии - внутримолекулярная циклизация норборнадиена до квадрициклана, норборнадиены, содержащие в положении 2 фрагменты пирилиевых катионов, фотоциклизация нитронов до оксазиридинов.

2.3. Заключение.

Основное преимущество органических фотохромных систем перед неорганическими состоит в возможности широкого варьирования строения молекул для оптимизации процесса запасаания энергии: батохромное смещение длинноволнового поглощения, повышение квантового выхода фотореакции, увеличение теплового эффекта обратной

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2
	Знать:		
1	– основные закономерности электронного строения твердых тел на нано-, микро- и макроуровне;	+	
2	– важнейшие типы современных материалов, их свойства и область применения;	+	
	– основные характеристики электронной структуры различных типов материалов и их влияние на свойства получаемого материала;		+
	– методы исследования электронного строения молекул и материала и прогнозирования его работоспособности в заданных условиях эксплуатации;		+
	Уметь:		
3	– использовать полученные знания о взаимосвязи состава/электронной структуры материала с его свойствами для решения задач дизайна материалов с заданными свойствами;	+	
4	– оценивать перспективы использования материала для решения различных задач промышленности;		+
	– применять современные научно-технические достижения для решения проблем наук о материалах и смежных наук		+
	Владеть:		
5	– способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области материаловедения	+	+
6	– методологическими подходами к изучению электронной структуры материалов;	+	+
7	– способностью генерировать новые идеи при решении практических задач в области наук о материалах.	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>			
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	

8	ПК-6.Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+
		ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+
		ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для изучения реакционной способности органических и гибридных материалов.	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Расчеты электронной структуры молекул и материалов методами квантовой химии.	8
2	1	Фотоэлектронная спектроскопия – основной метод оценки уровней энергии электронов в органических молекулах.	8
3	1	Электронная трансмиссионная спектроскопия - метод оценки вакантных электронных уровней органических молекул.	8
4	1	Электронная спектроскопия поглощения и испускания (флуоресцентная спектроскопия) методы изучения возбужденных состояний молекул.	8
5	1	Полярография и метод электронного парамагнитного резонанса – методы изучения ион-радикалах	8
6	2	Фотовольтаические ячейки: устройство элементарной солнечной ячейки; основные процессы, протекающие в солнечной ячейке	8
7	2	Фотовольтаические ячейки: роль структуры доноров и акцепторов в достижении максимальной эффективности.	6
8	2	Фотохимические реакции для запасаения энергии: основные критерии отбора.	6
9	2	Фотохимические реакции для запасаения энергии: примеры внутримолекулярная циклизация норборнадиена до квадрициклана, фотоциклизация нитронов до оксазиридинов	4

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **экзамена** (7 семестр) и лабораторного практикума по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения,

предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 60 (7 семестр) составляет 30 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 6 вопросов, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 1.

Перспективы дизайна «умных» материалов.

Вопрос 2.

Методы *ab initio* в расчетах электронной структуры молекул и материалов.

Вопрос 3.

Методы DFT в расчетах электронной структуры молекул и материалов

Вопрос 4.

Анализ результатов расчетов молекулы бензола.

Вопрос 5.

Определение числа и значений потенциалов ионизации молекулы. Теорема Купманса: ее эффективность и ограничения

Вопрос 6.

Методы полярографии и спектроскопии ЭПР для изучения граничных электронных уровней молекул

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 6 вопросов, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 1.

Органические и гибридные солнечные батареи.

Вопрос 2.

Роль электроциклических органических реакций, сопровождаемых образованием пространственно-напряженных структур, в аккумулировании солнечной энергии

Вопрос 3.

Энергетика процессов ассоциации и сольватации в рамках различных подходов

Вопрос 4.

Полярография – метод измерения энергий занятых и вакантных энергетических уровней

органических молекул в условиях ассоциации

Вопрос 5.

Информация о высших занятых молекулярных орбиталях из результатов изучения положения полос с переносом заряда в электронных абсорбционных спектрах соответствующих комплексов органических субстратов с п-акцепторами.

Вопрос 6.

Методы расчета электронной структуры молекул

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (7 семестр – экзамен).

1. Характеристика методов расчетов электронной структуры молекул и материалов
2. Методы *ab initio* в расчетах электронной структуры молекул и материалов.
3. Методы DFT в расчетах электронной структуры молекул и материалов
4. Определение числа и значений потенциалов ионизации молекулы. Теорема Купманса: ее эффективность и ограничения.
5. Методы оценки электронного сродства и энергий вакантных электронных уровней молекул/
6. Методы полярографии и спектроскопии ЭПР для изучения граничных электронных уровней молекул.
7. Типы и вероятности электронных переходов в ЭАС. Сила осциллятора и интенсивность полосы. Правила отбора.
8. Флуоресцентная спектроскопия.-метод изучения возбужденных состояний молекул.
9. Замедленная (отложенная) флуоресценция: физические основы метода, «работа» в OLED материалах.
10. Методы оценки спиновой плотности в. ион-радикалах Циклическая вольтамперометрия.
11. Устройство элементарной солнечной ячейки; основные процессы, протекающие в солнечной ячейке
12. Роль структуры доноров и акцепторов в достижении максимальной эффективности.
13. Ширина запрещенной зоны и ее оценки расчетами и экспериментом.
14. Основные критерии отбора фотохимических реакций для запасаения энергии.
15. Орбитальный контроль и квантовые выходы фотохимических реакций.
16. Внутримолекулярная циклизация норборнадиена до квадрициклана для запасаения энергии,
17. Фотоциклизация нитронов до оксазиридинов для запасаения энергии

Максимальное количество баллов за экзамен (7 семестр)– 40 баллов.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (7 семестр).

Пример билета для экзамена:

<i>«Утверждаю»</i> Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии»
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии»
	Молекулярная электроника
Билет № 1	
1. Фотоэлектронная спектроскопия – основной метод оценки уровней энергии электронов в органических молекулах. 2. Фотохимические реакции для запасаения энергии: основные критерии отбора.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Lakowicz J. R. Fluorescence Sensing. Princ. Fluoresc. Spectrosc. 2006, p. 623.
2. Hüfner S. Photoelectron spectroscopy: principles and applications, Springer, Berlin; New York, 2003.
3. Traven V.F., Cheptsov D.A. Russ. Chem. Rev. 2020, V. 89, p. 713.

Б. Дополнительная литература

Травень В.Ф. Органическая химия, 2-е изд., испр., М.: Лаборатория знаний, 2016.
Т. 1 – 368 с. Т. 2 – 517 с. Т. 3 – 388 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- ACS Nano. ISSN: 1936-0851, 1936-086X
- Computational Materials Science. ISSN: 0927-0256
- Advanced Composite Materials. ISSN: 1568-5519
- Advanced Materials. ISSN: 1521-4095
- Chemistry of Materials. ISSN: 1520-5002
- Journal of Applied Crystallography. ISSN: 1600-5767
- Nature Materials. ISSN: 1476-4660

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 10, (общее число слайдов – 230).
- цифровые копии учебных материалов, находящихся в открытом доступе в сети Интернет.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ,

ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Молекулярная электроника»* проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

- Учебная аудитория для проведения лекционных и практических занятий, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.
- Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с выходом в Интернет и доступом к базам данных.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

1.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Электронная структура органических материалов на молекулярном уровне.	<i>Знает:</i> – основные закономерности электронного строения твердых тел на нано-, микро- и макроуровне; – важнейшие типы современных материалов, их свойства и область применения; <i>Умеет:</i> – использовать полученные знания о взаимосвязи состава/электронной структуры материала с его свойствами для решения задач дизайна материалов с заданными свойствами; <i>Владеет:</i> – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области материаловедения; – методологическими подходами к изучению электронной структуры материалов; – способностью генерировать новые идеи при решении практических задач в области наук о материалах.	Оценка за контрольную работу №1, №2 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)
Раздел 2. «Работа» электронной структуры в материалах генерации, преобразования и сохранения энергии.	<i>Знает:</i> – основные характеристики электронной структуры различных типов материалов и их влияние на свойства получаемого материала; – методы исследования электронного строения молекул и материала и прогнозирования его	Оценка за контрольную работу №3 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)

	работоспособности в заданных условиях эксплуатации; <i>Умеет:</i> – оценивать перспективы использования материала для решения различных задач промышленности; – применять современные научно-технические достижения для решения проблем наук о материалах и смежных наук. <i>Владеет:</i> – способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области материаловедения; – методологическими подходами к изучению электронной структуры материалов; – способностью генерировать новые идеи при решении практических задач в области наук о материалах.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Органическая химия»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена заведующим кафедрой Сколтеха профессором В.Ф.Травенем

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия**, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение двух семестров.

Дисциплина «**Органическая химия**» относится к основной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области математических и естественнонаучных дисциплин (курсов высшей математики, общей и неорганической химии), а также компетенций, полученных при изучении органической химии в средней школе.

Цель дисциплины – углубленное изучение студентами фундаментальных основ - концепций и механизмов реакций современной органической химии.

Задачи дисциплины

- формирование знаний теоретических основ современной органической химии, методов получения различных классов органических соединений, их физических и химических свойств;

- приобретение навыков применения теоретических представлений и синтетических методов органической химии к решению практических задач современного органического синтеза.

Дисциплина «**Органическая химия**» преподается во 2 и 3 семестрах. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;
Безопасность жизнедеятельности	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций помощь, описывает способы участия в восстановительных мероприятиях

Общепрофессиональных компетенций и индикаторов их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- фундаментальные теоретические представления органической химии концепции строения органических соединений и механизмы органических реакций;

Уметь:

- формировать стратегию синтеза сложных органических соединений, выбирать оптимальные пути синтеза;

Владеть:

- теоретическими концепциями для предсказания и объяснения результатов органических реакций.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего		Семестр			
			2		3	
	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	15	540	6	216	9	324
Контактная работа – аудиторные занятия:	9,9	352	3,6	128	6,3	224
Лекции	3,6	128	1,8	64	1,8	64
Практические занятия (ПЗ)	3,6	128	1,8	64	1,8	64
Лабораторные работы (ЛР)	2,7	96	-	-	2,7	96
Самостоятельная работа	3,1	116	1,4	52	1,7	64
Контактная самостоятельная работа	3,1		1,4		1,7	
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		116		52		64
Виды контроля:						
зач / зач с оц.			-	-	-	-
Экзамен	2	72	1	36	1	36
Контактная работа – промежуточная аттестация	2	0,8	1	0,4	1	0,4
Подготовка к экзамену.		71,2		35,6		35,6
Вид итогового контроля:			экзамен		экзамен	

Вид учебной работы	Всего		Семестр			
			2		3	
	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	15	405	6	162	9	243
Контактная работа – аудиторные занятия:	9,9	267,2	3,6	97,2	6,3	170
Лекции	3,6	97,2	1,8	48,6	1,8	48,6
Практические занятия (ПЗ)	3,6	97,2	1,8	48,6	1,8	48,6
Лабораторные работы (ЛР)	2,7	72,8			2,7	72,8
Самостоятельная работа	3,1	УП	1,4	37,8	1,7	46
Контактная самостоятельная работа	3,1		1,4		1,7	
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		85,8		37,8		46
Виды контроля:						
зач / зач с оц.			-	-	-	-
Экзамен	2	УП	1	27	1	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	2	0,6	1	0,3	1	0,3
Подготовка к экзамену.		53,4		26,7		26,7
Вид итогового контроля:			экзамен		экзамен	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лек-ции	Прак. зан.	Лаб. работы	Сам. работа
1.	Раздел 1. Строение органических соединений и механизмы реакций	180	64	64	-	52
1.1	Современные представления о ковалентной связи. Концепции реакционной способности органических соединений	22,5	8	8	-	6,5
1.2	Методы изучения механизмов органических реакций	22,5	8	8	-	6,5
1.3	Реакции электрофильного присоединения к алкенам и алкинам (реакции AdE)	22,5	8	8	-	6,5
1.4	Реакции нуклеофильного замещения у алифатического С-атома (реакции SN) и элиминирования (реакции E). Анхимерное содействие в реакциях SN.	22,5	8	8	-	6,5
1.5	Теория ароматичности.	22,5	8	8	-	6,5
1.6	Реакции электрофильного ароматического замещения (реакции SEAr)	22,5	8	8	-	6,5
1.7	Реакции нуклеофильного замещения при кратной углерод-углеродной связи и в ароматическом ядре.	22,5	8	8	-	6,5
1.8	Металлоорганические и элементоорганические реагенты органического синтеза	22,5	8	8	-	6,5
2.	Раздел 2. Реакции и методы синтеза органических соединений	468	64	64	96	64
2.1	Реакции нуклеофильного присоединения по карбонильной группе (реакции AdN).	29	8	8	6	7
2.2	Енолизация карбонильных соединений, реакции енолят-ионов и их аналогов	29	8	8	6	7
2.3	Реакции нитронат-ионов. Реакция Анри	29	8	8	6	7
2.4	Реакции окисления, восстановления и защиты функциональных групп	29	8	8	6	7
2.5	Перициклические реакции	29	8	8	6	7
2.6	Реакции циклоалканов и их гетероатомных аналогов	29	6	6	6	7
2.7	Реакции, катализируемые соединениями переходных металлов	29	6	6	6	7
2.8	Реакции, протекающие с промежуточным образованием свободных радикалов, карбенов, нитренов и их аналогов	29	6	6	6	7

2.9	Основные понятия планирования многостадийных синтезов	30	6	6	6	8
	ИТОГО	468	128	128	96	104
	Экзамен	72				
	ИТОГО	540				

4.2 Содержание разделов дисциплины

2 семестр

Раздел 1. Строение органических соединений и механизмы реакций

1.1. Современные представления о ковалентной связи. Концепции реакционной способности органических соединений

Современные представления о ковалентной связи. Описание электронной структуры органических молекул в терминах теории валентных связей (теория ВС). Резонансная стабилизация нейтральных органических молекул и интермедиатов органических реакций.

Основные положения теории и методов молекулярных орбиталей. Метод МО Хюккеля. Понятие о полуэмпирических методах, основанных на приближении Хартри-Фока (MNDO, AM1, PM3 и др.). Методы abinitio. Оценки распределения электронной плотности в нейтральных органических молекулах и интермедиатах органических реакций в терминах теории МО. Расчеты поверхности потенциальной энергии реагирующих систем. Основные положения теории функционала электронной плотности (DFT).

Теории кислот и оснований в органической химии. Термодинамический контроль органических реакций. Уравнение состояния Гиббса: свободная энергия, энтальпия и энтропия равновесной органической реакции. Оценки констант равновесия органических реакций и изомеризационных превращений по их термодинамическим параметрам. Кислоты Бренстеда: OH-, CH-, NH- и SH-кислоты. Электронное и пространственное строение соответствующих сопряженных оснований - оксид-ионов, карбанионов, амид-ионов, тиолат-ионов; факторы, определяющие их устойчивость. Основания Бренстеда: p-, π- и σ-основания. Факторы, определяющие основность по Бренстеду: гибридизация гетероатома, резонансная стабилизация оснований Бренстеда и их сопряженных кислот, стереоэлектронные эффекты. Зависимость термодинамических параметров (энтальпии и энтропии) кислотно-основных равновесий от растворителя. Классификация растворителей: полярные – неполярные, протонные – апротонные. Кислотность и основность органических соединений в газовой фазе.

Кислоты Льюиса: нейтральные и заряженные, π- и σ-. Электрофильные свойства кислот Льюиса. Карбокатионы – кислоты Льюиса; строение, классификация по типу гибридизации C-атома и вакантной орбитали; эффекты стабилизации - резонансная стабилизация, стереоэлектронные эффекты. Мостиковые и ароматические катионы. Основания Льюиса: p-, π- и σ-основания. Жесткие и мягкие кислоты и основания: эмпирическая классификация и количественная трактовка Пирсона. Кислотно-основные реакции Льюиса. Карбокатионы – интермедиаты органических реакций.

Реакции кислот и оснований с позиции теории МО. Концепция граничных орбиталей. Расчетные и экспериментальные оценки энергий и симметрии граничных орбиталей. Потенциалы ионизации и электронное сродство органических молекул. Жесткость и мягкость электронных оболочек молекул и реагирующих систем. Подход Клопмана. Зарядовый и орбитальный контроль органических реакций. Ион-радикалы – интермедиаты органических реакций. Оценки распределение спиновой плотности в ион-радикалах по данным спектроскопии ЭПР и квантовохимических расчетов.

1.2. Методы изучения механизмов органических реакций

Понятие о механизме органической реакции. Классификация органических реакций по механизму. Методы изучения механизмов реакций.

Кинетический метод. Кинетика и механизм органической реакции. Свободная энергия, энтальпия и энтропия активации. Кинетический контроль органических реакций. Переходные состояния. Постулат Хэммонда. Порядок кинетического уравнения и молекулярность реакции. Метод стационарного состояния (принцип Боденштейна). Кинетические изотопные эффекты (первичный и вторичный, нормальный и обратный) о механизме органической реакции.

Принцип линейности свободных энергий. Уравнение Гаммета. Константы заместителей σ и константа реакции ρ . Модифицированные константы заместителей (σ_0 , σ^- , σ^+). Уравнение Тафта. Индукционные константы заместителей σ^* . Стерические константы E_S заместителей. Уравнение Грюнвальда – Уинстейна. Параметры растворителей γ . Применение корреляционного анализа для изучения механизмов органических реакций. Малополярные и высокополярные переходные состояния. Примеры нелинейных зависимостей свободных энергий.

Сtereoхимический метод в изучении механизмов органических реакций. Эффекты стабилизации конформационных изомеров алканов, алкенов, гетероатомных молекул (аминов, эфиров, альдегидов, кетонов). Природа стереоэлектронных эффектов. Динамическая стереохимия: стереоселективные и стереоспецифические реакции; прохиральные молекулы; гетеротопные (энантиотопные) атомы и стороны в органических реагентах; сохранение и обращение конфигурации; рацемизация и эпимеризация. Примеры стереоселективных и стереоспецифических реакций: гидрирование, восстановление кетонов, эпоксицирование аллиловых спиртов, Энантиомерные и диастереомерные переходные состояния.

1.3. Реакции электрофильного присоединения к алкенам и алкинам (реакции AdE)

Реакции электрофильного присоединения к алкенам: AdE_2 и AdE_3 . Открытые карбокатионы, тесные ионные пары, симметричные и несимметричные циклические (мостиковые) катионы, циклические незаряженные переходные состояния в механизмах реакций AdE_2 и AdE_3 . Кинетика, региоселективность и стереоспецифичность реакций AdE ; особенности реакций с циклоалкенами. σ -Анализ о природе переходного состояния реакций AdE . Реакции с галогенами и галогеноводородами. Гидроборирование: реагенты, обеспечивающие высокую региоселективность; превращения алкилборанов в алканы, спирты, амины, галогеналканы. Реакции с иодацилатами. Синтезы на основе аддуктов алкенов с иодацилатами. Иодлактонизация. Син- и анти-дигидроксилирование (реакции Криге, модификация Майлса, Вудварда, Прево). Реакции эпоксицирования алкенов и превращения оксиранов. Реакции сульфенилирования и селенирования алкенов. Селенолактонизация. Активирование слабых электрофилов в реакциях AdE их комплексообразованием с кислотами Льюиса.

Реакции электрофильного присоединения к алкинам; типы механизмов и интермедиатов; регио- и стереоселективность. Реакции с галогенами и галогеноводородами, гидроборирование (и реакции винилборанов), сульфенилирование, гидратация. Кросс-сочетание алкинов: реакции Глазера, Кадио-Ходкевича, Кастро-Стефенса, Соногаширы. Реакции винилирования спиртов, тиолов, аминов, карбоновых кислот, амидов с участием терминальных алкинов (реакции Реппе)

1.4. Реакции нуклеофильного замещения у алифатического C-атома (реакции S_N) и элиминирования (реакции E). Анхимерное содействие в реакциях S_N .

Бимолекулярное нуклеофильное замещение у алифатического C-атома (реакции S_N2). Одностадийный (синхронный) механизм. Влияние нуклеофила; нуклеофильность и основность нуклеофилов. Шкалы нуклеофильности. Нуклеофильные константы Свена—Скотта. Влияние сольватации на нуклеофильность. Корреляционные уравнения Свена—

Скотта и Эдвардса. Влияние строения субстрата. Причины значительной роли стерического фактора в реакциях SN2. Зависимость качества уходящей группы отееосновности.

Мономолекулярное нуклеофильное замещение у алифатического С-атома (реакции SN1). Двухстадийный (ионизационный) механизм. Кинетика первого порядка. Влияние строения субстрата. Ионизирующая способность растворителя. Уравнение Грюнвальда-Уинстейна. Стереохимия реакций SN1: рацемизация и рацемизация с обращением. Роль тесных и рыхлых ионных пар в стереохимии реакций SN1.

Сохранение конфигурации в реакциях нуклеофильного замещения SN2. Механизм анхимерного содействия – двойное обращение конфигурации; роль энтропийного фактора. Циклические интермедиаты. Анхимерное содействие со стороны гетероатомов, π (C=C, арил)- и σ (C-C, C-H)-связей. Реакции производных норборнена и норборнана. Неклассические карбокатионы и их резонансная стабилизация.

Амбидентныенуклеофилы (нитрит-, цианид-, цианат-, тиоцианат-, енолят-, сульфит- и гидросульфит-ионы) в реакциях нуклеофильного замещения.

Механизмы реакций элиминирования: E1, E2, E1cb и E1cb-like. Региоселективность и стереоспецифичность. Стереoeлектронные требования и стереоспецифичность при E2-элиминировании. Влияние природы основания и нуклеофуга на направление элиминирования. Влияние растворителя и температуры на конкуренцию реакций замещения и элиминирования. Термическое син-элиминирование. син-Элиминирование N-окисей третичных аминов по Коупу.

Трансформации функциональных групп с применением нуклеофильного замещения у алифатического С-атома. Превращение спиртов в алкилирующие агенты. Реакции спиртов с тионилхлоридом (с участием растворителя и без него) и с галогенидами фосфора. Реакции замещения гидроксигруппы с промежуточным образованием алкоксифосфониевых интермедиатов. Реакция Мицунобу. Получение нитрилов, азидов, аминов, амидов, эфиров. Получение эфиров карбоновых и сульфокислот. Реакции с участием нуклеофильных производных фосфора и серы.

1.5. Теория ароматичности.

Ароматичность, антиароматичность и неароматичность. Правило Хюккеля и его квантово-химическая трактовка. Критерии ароматичности органических соединений: экспериментальные (теплоты реакций, спектры ЯМР, рентгеноструктурный анализ) и квантово-химические. Недостаточность теории резонанса в описании ароматичности. [n]Аннулены: синтез, строение и реакции, Ароматические катионы и анионы: получение, оценки устойчивости. Гомоароматические ионы. Конденсированные аналоги [n]аннуленов: пентален, гептален, азулен. Полициклические ароматические углеводороды: нафталин, антрацен, фенантрен. Гетероароматические соединения. Элементоорганические и металлоорганические ароматические соединения: элемента- и металлабензолы. Ароматичность переходных состояний.

1.6. Реакции электрофильного ароматического замещения (реакции SEAr)

Общая схема механизма реакций электрофильного ароматического замещения (реакции SEAr). Строение и примеры идентификации π - и σ -комплексов – интермедиатов реакций SEAr. Кинетические изотопные эффекты в реакциях SEAr. Скорость определяющая стадия. Влияние заместителей: о/п-ориентанты (сильно активирующие, умеренно активирующие, слабоактивирующие, слабодезактивирующие); м-ориентанты (умеренно дезактивирующие, сильно дезактивирующие). Количественные оценки ориентирующего влияния заместителей. Факторы парциальных скоростей. Оценки селективности к положению и субстрату в реакциях SEAr. Объяснение ориентации с позиций теории резонанса и концепции граничных орбиталей. ор-Анализ о природе

переходного состояния реакций SE_{Ar} : ранние и поздние переходные состояния. Процессы одноэлектронного переноса в реакциях SE_{Ar} .

Особенности отдельных реакций электрофильного ароматического замещения: электрофильные реагенты, кинетика, примеры препаративных протоколов. Применение в качестве электрофилов производных сильных карбоновых и сульфоновых кислот (CF_3COOH , CF_3SO_3H): реакции галогенирования, нитрования, алкилирования, ацилирования, гидроксирования, металлирования.

Реакции в полизамещенных аренах. Согласованная и несогласованная ориентация заместителей. Реакции ипсо-замещения. Направленный синтез полизамещенных ароматических соединений.

1.7. Реакции нуклеофильного замещения при кратной углерод-углеродной связи и в ароматическом ядре.

Механизмы нуклеофильного замещения у sp^2 -гибридного атома углерода. Нуклеофильное замещение у винильного С-атома; механизм присоединения-отщепления. Нуклеофильное замещение в активированных ароматических галогенпроизводных. Комплексы Мейзенгеймера. Данные σ -анализа о механизме присоединения-отщепления. Нуклеофильное замещение в неактивированных галогенпроизводных бензола. Ариновый механизм. Реакции нуклеофильного замещения у ароматического атома углерода, катализируемые соединениями меди и палладия. Реакция Розенмунда-Брауна; каталитический цикл нуклеофильного замещения галогена в галогенаренах в присутствии меди (+1). Биарильная конденсация Ульмана. Нуклеофильное замещение водорода. Викариозное нуклеофильное замещение в ароматических гетероциклах.

1.8. Металлоорганические и элементоорганические реагенты органического синтеза

Методы получения металлоорганических соединений: реакции металлов с галогенопроизводными, обменные реакции металлоорганических соединений с солями металлов. Механизмы обменных реакций. Электрофильное замещение у алифатического С-атома; особенности стереохимии. Электронное строение и нуклеофильные свойства соединений со связью С-элемент и С-металл. Зависимость ионности связи С-металл от электроотрицательности металла.

Получение магниорганических соединений (реагентов Гриньяра); особенности механизмов реакций магния с галогеналканами, а также с арил-, винил- и циклопропилгалогенидами. Влияние строения углеводородного фрагмента и растворителя на конфигурационную устойчивость реактивов Гриньяра. Особенности получения реактивов Гриньяра из винилгалогенидов. Реагенты Нормана. Строение реактивов Гриньяра в растворителях. Основные и нуклеофильные свойства реактивов Гриньяра. Реакции с аллил- и бензилгалогенидами, алкилсульфонатами; обменные реакции с галогенидами металлов и металлоидов.

Получение литийорганических соединений: реакции галогенпроизводных с литием и бутиллитием, реакции переметаллирования, восстановление органических сульфидов литием. Особенности литирования ароматических соединений, содержащих активирующие и ориентирующие функциональные группы: алкокси-, амидо-, сульфоксидо-, сульфонильные группы, атомы фтора. Конфигурационная устойчивость литийорганических реактивов. Влияние растворителя на ассоциацию. Литийалканы, литийалкены, литийалкины и литийарены в реакциях нуклеофильного замещения у алифатического атома углерода. Литийдиалкилкупраты: получение и особенности их реакций как нуклеофилов.

3 семестр

Раздел 2. Реакции и методы синтеза органических соединений

2.1. Реакции нуклеофильного присоединения по карбонильной группе (реакции AdN).

Реакции карбонильных соединений с O-, S-, N- и H-нуклеофилами. Механизмы нуклеофильного присоединения по карбонильной группе (реакции AdN); особенности механизма реакций с сильными и слабыми нуклеофилами; основной и кислотный катализ (общий и специфический) реакций нуклеофильного присоединения по карбонильной группе. Факторы, определяющие реакционную способность карбонильных соединений в реакциях AdN. Гидратация альдегидов и кетонов. Ацетали и тиоацетали; применение циклических ацеталей и их тиоаналогов в органическом синтезе. Синтезы на основе 1,3-дитианов. «Обращение полярности» карбонильной группы. Реакции с N-нуклеофилами; стереохимия восстановления циклических и бициклических кетонов. Правило Крама. Реакции с C-нуклеофилами. Получение циангидринов и синтезы на их основе. Реакции карбонильных соединений с реактивами Гриньяра; механизмы AdN и включающий стадию одноэлектронного переноса. Побочные превращения реактивов Гриньяра, обусловленные стерическими затруднениями в их реакциях с карбонильными соединениями. Стереохимия реакций карбонильных соединений с реактивами Гриньяра. Литийорганические реагенты как нуклеофилы в реакциях AdN. CН-Кислотность органических соединений фосфора, серы и кремния и их применение в реакциях AdN.

Реакции Виттига (и в модификации Шлоссера), Хорнера-Уодсворта-Эммонса, Кори-Чайковского, Жулиа-Лижо (и в модификации Коцински), Петерсона; реагенты, особенности протоколов, стереохимия, синтезы E- Z-алкенов и оксиранов. Кинетический и термодинамический контроль реакций олефинирования. Стереохимия реакций нуклеофильного присоединения по карбонильной группе.

Реакции конденсации карбонильных соединений с N-нуклеофилами. Механизмы синтеза (механизм AdN-E) и гидролиза соединений с кратной связью C=N. Зависимость скорости гидролиза от pH. Данные ор-анализа. Синтез енаминов. Примеры генерации азометинилидов *in situ* реакцией вторичных аминокислот с 1,2-дикетонами (decarboxylativecondensation вторичных аминокислот с 1,2-дикетонами).

Механизмы реакций нуклеофильного замещения у карбонильной группы в производных карбоновых кислот. Тетраэдрический механизм. Данные ор-анализа, изотопные метки и стереохимические результаты в доказательствах механизма. Катализ в реакциях нуклеофильного замещения у карбонила: кислотный (специфический и общий), основной (специфический и общий), нуклеофильный и нуклеофильный внутримолекулярный. Особая роль в реакциях биоорганических субстратов. Бифункциональные катализаторы. Методы ацилирования OH- и NH₂-функций. Реакции прямого и сопряженного присоединения α,β – ненасыщенных карбоновых кислот и их производных.

2.2. Енолизация карбонильных соединений, реакции енолят-ионов и их аналогов

CН – Кислотность и кето-енольная таутомерия альдегидов и кетонов; влияние строения и растворителя. Условия термодинамического и кинетического контроля процесса енолизации. Региоселективность и стереоселективность образования енолят-ионов из кетонов и сложных эфиров. Методы генерирования енолят-ионов: депротонирование карбонильного соединения, из силиловых эфиров енолов, из α,β – ненасыщенных кетонов. Влияние растворителя на строение и реакционную способность енолят-ионов.

Реакции енолят-ионов с электрофилами. Амбидентность енолят-ионов. Региоселективные реакции по O – и C– атомам с жесткими и мягкими электрофилами. Алкилирование енолят-ионов: алкилирование альдегидов, карбоновых кислот, сложных

эфиров, амидов и нитрилов. Стереохимия алкилирования. Стереоспецифичное алкилирование производных карбоновых кислот (N-ацилоксазолидиноны как интермедиаты). Генерация и алкилирование дианионов. Внутримолекулярное алкилирование енолятов. Перегруппировка Фаворского. Особенности реакций алкилирования енолят-ионов β -дикарбонильных соединений; влияние растворителя. Азотсодержащие аналоги енолов и енолят-ионов: енамины, иминиевые ионы.

Реакции альдольного присоединения и альдольной конденсации; механизмы основного и кислотного катализа. Перекрестные альдольные конденсации. Реакция Клайзена-Шмидта. Региоселективность и стереохимия направленного альдольного присоединения (directed aldol addition). Альдольное присоединение с участием енолятов бора, титана, силиловых эфиров энолов, катализируемое кислотами Льюиса (реакции Мукайямы). Внутримолекулярные альдольные конденсации. Реакции енольных форм сложных эфиров: сложноэфирная конденсация Клайзена, внутримолекулярная конденсация сложных эфиров (реакция Дикмана). Реакции Реформаторского, Дарзена. Конденсации Кневенагеля, Дебнера, Перкина. Реакции иминиевых ионов с енолами, енолятами бора, силиловыми эфирами енолов. Реакция Манниха.

Ион-радикальные реакции кетонов и сложных эфиров. Реакция Буво-Блана. Пинаколиновая восстановительная димеризация кетонов. Ацилоиновая конденсация. Синтез макроциклов по Штолю-Прелогу.

Диспропорционирование неенолизуемых альдегидов в реакции Канниццаро. Схемы три- и тетрамолекулярного механизмов: кинетика, изотопные эффекты, данные анализа.

α, β – Ненасыщенные альдегиды и кетоны в реакциях с нуклеофилами; методы получения, механизмы их реакций прямого и сопряженного присоединения. Механизм присоединения по Михаэлю цианид-иона, металлоорганических соединений, аминов и енаминов (реакция Сторка), нитронат-ионов, триалкилборанов, силиловых эфиров енолят-ионов (реакция Мукайямы-Михаэля). Аннелирование по Робинсону. Нитроалкены как акцепторы в реакциях Михаэля.

2.3. Реакции нитронат-ионов. Реакция Анри

Строение, термодинамическая и кинетическая кислотность нитросоединений. Роль основания и растворителя в процессах генерации нитронат-ионов.

Реакции нитронат-ионов как C-нуклеофилов: галогенирование, нитрозирование, реакция Нефа. Таутомерия нитросоединений. Нитроальдольная конденсация (реакция Анри). Получение и трансформации нитроспиртов: восстановление нитрогруппы, окисление гидроксигруппы, получение нитроалкенов. Применение реакция Анри в синтезе природных соединений.

Аза-реакция Анри – реакция иминов с нитронат-ионами. Получение и трансформации нитроаминов.

2.4. Реакции окисления, восстановления и защиты функциональных групп

Реакции окисления функциональных групп. Окисление спиртов. Окисление двойных связей: получение эпоксидов и их реакции, расщепление двойных связей. Окисление кетонов и альдегидов. Реакция Байера-Виллигера. Окислительное расщепление при функциональных группах: расщепление гликолей, окислительное декарбоксилирование.

Реакции восстановления функциональных групп. Гидрирование кратных C=C-связей: гетерогенный и гомогенный катализ. Стереоспецифическое и стереоселективное гидрирование. Каталитическое гидрирование карбонильной и других функциональных групп. Особенности применения соединений элементов III и IV групп - доноров гидрид-ионов. Восстановление растворами металлов: присоединение водорода,

восстановительное удаление функциональных групп, восстановительная димеризация карбонильных соединений. Восстановительное деоксигенирование карбонильных групп: трансформация карбонильных групп до метиленовых и до двойной СС-связи. Восстановительное элиминирование и фрагментация.

Методы установления и снятия защитных групп. Защита гидроксигруппы. Выбор защитной группы при условии последующего ее удаления. Ацетали как защитные функции. Применение дигидропирана, (этил)винилового эфира, (метил)2-пропенилового эфира, метоксиметилового эфира, метоксиметилхлорида, β -метоксиэтоксиметилхлорида, метилтиометилхлорида для защиты гидроксигруппы. Трет-бутильная, бензильная, тритильная, 4-метоксифенильная, триметилсилильная защитные функции.

2.5. Перициклические реакции

Согласованные реакции. Концепция сохранения орбитальной симметрии и правила Вудворда—Гофмана. Реакции циклоприсоединения; классификация по числу электронов, по симметрии и геометрии перекрывания граничных орбиталей, участвующих в реакциях (σ - и π -, супра- и антароповерхностные); хелетропные реакции. Реакции Дильса-Альдера: стереохимия, эффект заместителей, катализ кислотами Льюиса. Типы смешивания граничных орбиталей: нормальное и обращенное. Региоселективность и стереоспецифичность [4+2]-циклоприсоединения в реакциях несимметричных субстратов. Внутримолекулярные реакции Дильса-Альдера. 1,3-Диполярное циклоприсоединение. Реакции азидов, диазоалканов, нитронов, нитрилоксидов, азометинилидов и азометиниминов с дипольофилами: региоселективность, стереоспецифичность, структура переходного состояния, катализ. Роль граничных орбиталей реагентов. Синтетические приложения реакций 1,3-диполярного циклоприсоединения. Катализируемые реакции циклоприсоединения азидов с алкинами. Click-химия (работы Шарплесса). Неперициклические реакции (4+2)-циклоприсоединения: цвиттерионные и бирадикальные интермедиаты. Ретродиеновые реакции.

Сигматропные перегруппировки. Классификация сигматропных перегруппировок по числу атомов в мигрирующем фрагменте и π -системе, по стереохимии (супра- и антароповерхностные, с сохранением и обращением конфигурации): [1,2] и [2,3] перегруппировки Виттига, [1,3]-, [1,5]- и [1,7] - сдвиги атомов водорода и алкильных групп, [3,3]-сигматропные перегруппировки (Коупа, окси-Коупа, Клайзена, Айрленда-Клайзена).

Электроциклические реакции. Орбитальная симметрия реагентов и стереоспецифичность электроциклических реакций. Примеры электроциклических реакций: 1,3-диены, 1,3,5-триены. Электроциклические реакции раскрытия циклов. Электроциклические реакции заряженных частиц. Электроциклизации гетероатомных триенов. Реакция Назарова.

2.6. Реакции циклоалканов и их гетероатомных аналогов

Классификация циклоалканов в соответствии с их химическими свойствами и энергией напряжения; малые, нормальные, средние и большие циклы. Методы получения циклопропана, циклобутана и их производных; методы синтеза нормальных циклов; синтез средних и больших циклов: перегруппировка Фаворского, реакции Назарова и Торпа-Циглера, ацилоиновая конденсация, реакции метатезиса олефинов.

Влияние ориентации функциональных групп (аксиальная-экваториальная) в замещенных циклогексанах и их гетероциклических аналогах на их реакционную способность; хемо-, регио- и стереоселективность реакций присоединения, замещения, элиминирования, окисления. Принцип Кертена-Гаммета. Аномерный эффект, его природа и примеры. Трансаннулярное перекрывание орбиталей и перегруппировки производных циклоалканов. Трансаннулярные реакции. Реакции расширения и сужения циклов при генерации карбокатионов — перегруппировки Вагнера — Меервейна; реакции с

сверхсильными кислотами, реакции сольволиза, дезаминирование первичных аминов. Перегруппировки Демьянова, Тиффено-Демьянова (семипинаколиновая). Карбанионные перегруппировки; перегруппировка Фаворского. Реакция расширения цикла при взаимодействии циклических кетонов с диазометаном или илидами серы. Конфигурационная жесткость и особенности реакций конденсированных циклоалканов.

2.7. Реакции, катализируемые соединениями переходных металлов

Получение и строение комплексов переходных металлов. Правило 18 электронов, гаптностьлигандов. Характеристика реакционной способности КПМ: реакции с электрофилами, нуклеофилами, реакции окислительного присоединения – восстановительного отщепления, внедрения – вытеснения. Каталитические циклы. Активация субстратов в каталитических реакциях путем присоединения: окислительное, гомолитическое, гетеролитическое, координация. Электронное и пространственное влияние лигандов на реакции металлокомплексов.

Органические синтезы с применением металлокомплексного катализа. Гидрирование различных функциональных групп: гидрирование кратных связей на гомогенных катализаторах (катализатор Уилкинсона), фрагментов аренов и гетаренов, карбонильной группы, нитрогруппы; асимметрическое гидрирование. Палладий-катализируемое активирование алкенов для реакций с нуклеофилами (Вакер-процесс).

Реакции арил- и алкенилгалогенидов (сульфонатов) с алкенами (реакция Хека): лиганды, сокатализаторы, каталитический цикл, модифицированные варианты реакции. Палладий – катализируемые реакции арил- и алкенилгалогенидов (сульфонатов) с металлоорганическими реагентами. Реакции кросс-сочетания Хека, Соногаширы, Сузуки, Стилле: каталитические циклы этих реакций, влияние различных факторов на отдельные стадии реакций кросс-сочетания (природа лиганда, роль основания, побочные превращения); синтетические приложения.

Метатезис олефинов, кросс-метатезис олефинов (требования к субстратам, синтетические примеры). Катализаторы Граббса, каталитический цикл. Реакционная способность замещённых двойных связей. Реакции раскрытия и замыкания циклов. Применение реакции для макроциклизации. Алкен-алкиновый метатезис. Межмолекулярный и внутримолекулярный механизмы.

Полимеризация алкенов на катализаторах Циглера-Натта. Металлокомплексный катализ с применением титанорганических производных. Реакция Кулинковича: субстраты, реагенты, каталитический цикл. Олефинирование по Теббе. Реагенты Теббе и Петасиса.

2.8. Реакции, протекающие с промежуточным образованием свободных радикалов, карбенов, нитренов и их аналогов

Методы генерирования свободных радикалов: реакции пероксидов, азосоединений, N-нитрозоанилидов, триалкилборанов, N-ацилокси-2-пиридинтионов. Строение и устойчивость свободных радикалов. Примеры стабильных свободных радикалов. Идентификация свободных радикалов методом ЭПР-спектроскопии.

Реакции, протекающие с образованием свободных радикалов в качестве интермедиатов. Реакции радикального замещения (реакции S_R): галогенирование (реакция Воля-Циглера), окисление, сульфохлорирование, сульфоокисление, нитрозирование, нитрование. Реакции радикального присоединения (реакции A_{DR}): присоединение галогеноводородов, галогенметанов, тиолов, тиокарбоновых кислот, Реакции присоединения к двойной $C=N$ связи. Перегруппировки и фрагментации свободных радикалов. Реакции замещения $S_{RN}1$.

Генерация и строение карбенов; влияние заместителей на синглетное и триплетное состояния. Источники карбенов: разложение N-нитрозопроизводных амидов, мочевины, сульфонамидов; фотолиз диазиринов; окисление гидразонов; превращения сульфонилгидразонов; α -элиминирование галогеналканов. Реакции карбенов и

карбеноидов (реагент Симмонса-Смита): реакции циклоприсоединения, реакции внедрения, перегруппировка Вольфа, реакция Арндта-Эйстерта (гомологизация карбоновых кислот, альдегидов и кетонов).

Нитрены и родственные интермедиаты. Реакции нитренов: перегруппировки, внедрение, азиридинование алкенов. Нитрены – интермедиаты перегруппировок: Курциуса, Шмидта, Тимана, Гоффмана, Бекмана.

2.9. Основные понятия планирования многостадийных синтезов

Ретросинтетический анализ (методология Кори). Ретросинтетическая стадия; первый предшественник, второй предшественник и т.д. Трансформы, ретроны, синтоны и их синтетические эквиваленты. Примеры решения задач направленного органического синтеза с применением ретросинтетического анализа

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2
	Знать:			
1	– фундаментальные теоретические представления органической химии – концепции строения органических соединений и механизмы органических реакций		+	+
	Уметь:			
2	– формировать стратегию синтеза сложных органических соединений, выбирать оптимальные пути синтеза		+	+
	Владеть:			
3	– теоретическими концепциями для предсказания и объяснения результатов органических реакций		+	+
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК		
7	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;	+	+
8	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций помощь, описывает способы участия в восстановительных мероприятиях	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>				
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК		

9	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	+	+
10	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	Раздел 1	Термодинамика органических реакций	6
2	Раздел 1	Кислоты и основания Бренстеда	6
3	Раздел 1	Карбокатионы: стабильность и реакции	6
4	Раздел 1	Расчеты электронной плотности методом МО	6
5	Раздел 1	Корреляционный анализ	4
6	Раздел 1	Кинетический метод	6
7	Раздел 1	Стереохимия	6
8	Раздел 1	Алкены	4
9	Раздел 1	Нуклеофильное замещение	4
10	Раздел 1	Ароматичность	4
11	Раздел 1	Электрофильное ароматическое замещение	6
12	Раздел 1	Реакции нуклеофильного ароматического замещения	6
13	Раздел 2	Реакции AdN карбонильных соединений	6
14	Раздел 2	Реакции с С-нуклеофилами	6
15	Раздел 2	Енолизация	4
16	Раздел 2	Реакции альдольного присоединения и конденсации	6
17	Раздел 2	Реакции нитронат-ионов и их аналогов. Сопряженное присоединение	6
18	Раздел 2	Реакции нуклеофильного замещения у С=О группы 1	6
19	Раздел 2	Реакции циклоприсоединения	4
20	Раздел 2	Электроциклические реакции	4
21	Раздел 2	Строение и реакции производных циклоалканов и их гетероаналогов	6
22	Раздел 2	Реакции, катализируемые комплексами переходных металлов	6
23	Раздел 2	Радикальные реакции	4
24	Раздел 2	Реакции с участием карбенов и нитренов	6

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого в дисциплине «*Органическая химия*». Лабораторный практикум состоит из трех блоков:

- 1) Безопасные приемы и правила работы в лаборатории органической химии.
- 2) Методы очистки и выделения органических веществ.
 - Методы очистки и выделения органических веществ. Общие методы работы. Посуда, наиболее часто применяемая в лаборатории. Нагревание. Охлаждение. Перемешивание.
 - Хроматография. Виды хроматографии. Применение ТСХ для идентификации органических соединений. Адсорбенты и элюенты, используемые в ТСХ. Выбор элюента. Обнаружение веществ. Коэффициент удерживания.
 - Методы очистки твердых веществ. Возгонка (сублимация). Переосаждение. Перекристаллизация. Определение температуры плавления. Метод «смешанной пробы».
 - Методы очистки жидких веществ. Простая и фракционная перегонка. Перегонка при атмосферном и пониженном давлении.

– Методы выделения органических веществ из реакционной смеси. Экстракция. Перегонка с водяным паром. Отгонка растворителя.

3) Синтезы органических веществ.

– Общие правила подготовки и проведения синтеза. Задача и сущность эксперимента. Теоретические основы процесса. Выбор условий реакции. Расчет синтеза. Техника безопасности. Прибор. Проведение опыта. Контроль за ходом реакции. Выделение, очистка и анализ продукта. В ходе практикума студент должен выполнить не менее 5 синтезов.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1		Техника безопасности. Хроматография.	4
2		Методы очистки. Перекристаллизация.	6
3		Методы очистки. Перегонка.	6
4	4.1, 5.1	Синтез. Бутилбромид	6
5	5.1, 6.2	Синтез. Этилацетат	6
6	5.1, 6.2	Синтез. Бензойная кислота.	6
7	5.2, 7.2, 7.3	Синтез. Фенол	6
8	4.1, 7.2, 7.3	Синтез. Йодбензол, хлорбензол	6
9	5.1, 6.1	Синтез. Ацетон	6
10	5.2, 7.1	Синтез. Нитрофенол	6
11	4.1, 6.2, 7.1, 7.2	Синтез. Ацетанилид. <i>n</i> -Броманилин, <i>n</i> -нитроанилин	6

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины «*Органическая химия*» предусмотрена самостоятельная работа студента бакалавриата в объеме 52 ак. ч во 2 семестре и 64 ак.ч в 3 семестре плюс 35,6 ч (подготовка к экзамену). Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- регулярную проработку пройденного на лекциях и практических занятиях учебного материала и подготовку к выполнению контрольных работ по разделам курса;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *экзамена* (2 и 3 семестр) и лабораторного практикума (3 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине во 2 семестре складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

Совокупная оценка по дисциплине в 3 семестре складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 20 балла) и итогового контроля в форме *экзамена*.

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

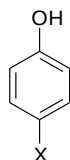
Для текущего контроля предусмотрено 6 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1,2 и 3 (2 семестр) составляет 60 баллов по 20 баллов за каждую. Максимальная оценка за контрольные работы 4,5 и 6 (6 семестр) составляет 40 баллов, по 15 баллов за работы 4 и 5 и по 10 баллов за работу 6.

2 семестр

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 4 балла за вопрос.

Вопрос 1.1.

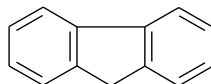
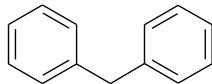
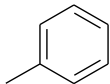
Расположите следующие фенолы в порядке повышения кислотности ($pK_a = 10.14, 9.38, 9.98, 10.21, 7.15, 9.95$). Ответ поясните сравнением электронных эффектов заместителей в сопряженных основаниях.



X = OMe, F, Cl, Me, H, NO₂

Вопрос 1.2.

Отнесите значения pK_a (41.0, 16.0, 28.6, 33.0) к следующим соединениям. Дайте объяснение

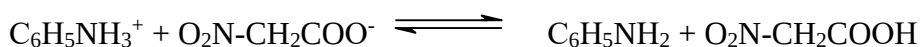


Вопрос 1.3.

Сравните кислотности салициловой и п-гидроксibenзойной кислот. Дайте объяснение.

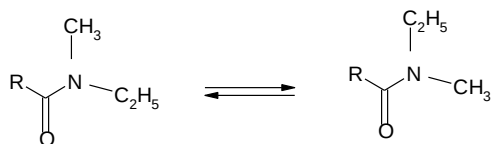
Вопрос 1.4.

Определите константу следующего равновесия, приняв, что $pK_a(C_6H_5NH_3^+) = 4.6$, а $pK_a(O_2N-CH_2COOH) = 1.68$.



Вопрос 1.5.

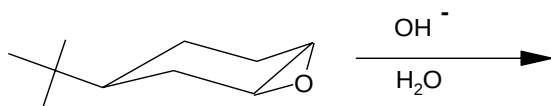
Объясните высокий барьер вращения (около 15 ккал-моль) в следующем превращении



Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 4 балла за вопрос.

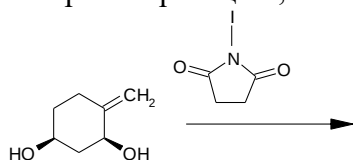
Вопрос 2.1.

Завершите реакцию, покажите стереохимию продукта



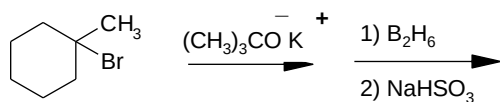
Вопрос 2.2.

Завершите реакцию, покажите ее механизм



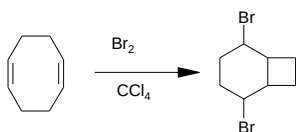
Вопрос 2.3.

Завершите реакции, предложите объяснение протекания каждой стадии



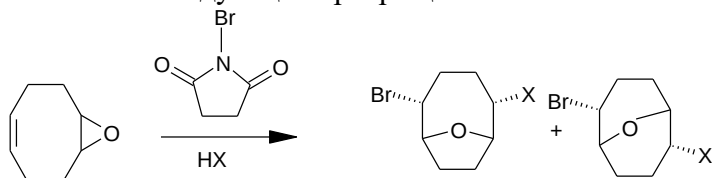
Вопрос 2.4.

Покажите механизм следующего превращения



Вопрос 2.5.

Объясните следующее превращение



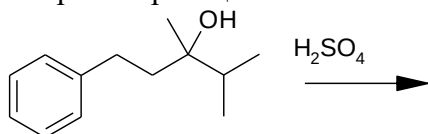
Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 4 балла за вопрос.

Вопрос 3.1.

Укажите критерии, на основании которых можно различить раннее и позднее переходные состояния в реакциях S_EAr .

Вопрос 3.2.

Завершите реакцию. Объясните результат.



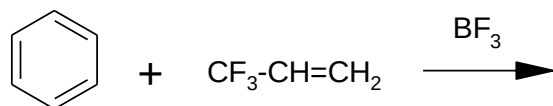
Вопрос 3.3.

Завершите реакции. Напишите механизм.



Вопрос 3.4.

Завершите реакцию. Объясните результат.



Вопрос 3.5.

Получите 2-нитрозорезорцин, исключая превращения диазосоединений

3 семестр

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 4. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 3 баллов за вопрос.

Вопрос 4.1.

Покажите типы механизмов реакций карбонильных соединений с нуклеофилами различной силы.

Вопрос 4.2.

Покажите синтетические возможности «обращения полярности» карбонильной группы в альдегидах.

Вопрос 4.3.

Покажите реакции олефинирования кетонов и альдегидов с применением P-, S- и Si-реагентов.

Вопрос 4.4.

Как меняются константы равновесия енол/кетон для ацетилаcetона и циклогексан-1,3-диона при переходе от CCl_4 к воде? Дайте объяснение.

Вопрос 4.5.

В чем суть термодинамического контроля енолизации? Поясните, как характер контроля влияет на региоселективность процесса и стереохимию енолят-иона. Приведите примеры

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 5. Максимальная оценка – 15 баллов. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 3 балла за вопрос.

Вопрос 5.1.

Покажите механизмы стадий дегидратации альдолей в присутствии оснований и кислот.

Вопрос 5.2.

На примере реакции этил(тр.бутил)кетона с бензальдегидом в присутствии LDA покажите, как провести направленное альдольное присоединение с образованием цис-аддукта и

транс-аддукта; покажите, как формируются соответствующие переходные состояния. Какова стереохимия альдольного присоединения с участием енолятов бора и титана?

Вопрос 5.3.

Покажите, как меняется термодинамическая и кинетическая кислотность при переходе от нитрометана к 2-нитропропану. Объясните соответствующие изменения.

Вопрос 5.4.

Покажите каталитическую роль триэтиламина в ацилировании метанола пропионилхлоридом.

Вопрос 5.5.

Завершите реакции пропена со следующими реагентами



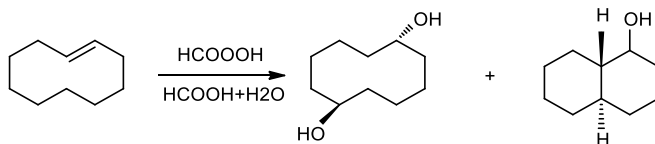
Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 6. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 2 балла за вопрос.

Вопрос 6.1.

Из 2,3-диметил-1,3-бутадиена, этилакрилата, пирролидона и циклопентанона получите 1,2-диметил-4-(2-циклопентанонилметил)циклогексен

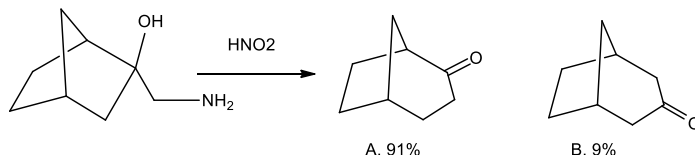
Вопрос 6.2.

Объясните следующий результат



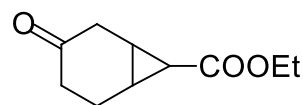
Вопрос 6.3.

Объясните следующий результат



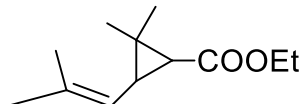
Вопрос 6.4.

Из анизол и диазоуксусного эфира получите



Вопрос 6.5.

Исходя из ацетона, ацетальдегида, трифенилфосфина и диазоуксусного эфира получите



8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – экзамен, 3 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов. Экзаменационный билет содержит 2 вопроса и 4 задачи.

1 вопрос – 10 баллов, вопрос 2 – 10 баллов, задачи по 5 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов

1. Кислотность органических соединений по Бренстеду. Факторы, определяющие стабильность сопряженных оснований ОН-, NH-, СН-кислот: резонансная стабилизация, стереоэлектронные эффекты, Н-связывание. Факторы, определяющие устойчивость карбанионов. Различия в изменениях энтропии при диссоциации сильных и слабых кислот.
2. Нуклеофильное замещение у насыщенного атома углерода. Механизм S_N2. Роль нуклеофила. Шкалы нуклеофильности. Жесткие и мягкие нуклеофилы. Пространственные и электронные эффекты заместителей в субстратах. Уходящие группы, их качество. Влияние растворителя на активность нуклеофилов.
3. Реакции кислот и оснований в терминах теории МО. Зарядовый и орбитальный контроль органических реакций. Ион-радикалы – интермедиаты органических реакций. Расчетные и экспериментальные методы определения спиновой плотности в ион-радикалах.
4. Реакции отщепления. Механизмы E₁, E₂ и E₁CB. Пространственные и электронные эффекты заместителей в субстратах. Влияние свойств основания и условий проведения реакции на скорость и механизм реакции. Регио- и стереохимия реакций отщепления. Правила Зайцева и Гофмана. Условия, необходимые для протекания син-элиминирования. Конкуренция между реакциями элиминирования и нуклеофильного замещения.
5. Понятие о механизме органической реакции. Примеры применения различных методов для изучения механизма: кинетический, стереохимический, метод меченых атомов, кинетические изотопные эффекты (первичный, вторичный, обратный), корреляционный анализ. Скоростопределяющее переходное состояние. Постулат Хэммонда.
6. Электрофильное присоединение к алкенам. Стереохимия присоединения галогенов и сульфенгалогенидов. Равновесие между открытыми и мостиковыми ионами: влияние природы алкена и электрофила. Симметричные и несимметричные "ониевые" ионы – интермедиаты реакций A_DE. Иодониевые производные - реагенты реакций A_DE. Реакции иодо- и селенолактонизации.
7. Динамическая стереохимия. Прохиральные молекулы. Гомотопные и гетеротопные атомы и стороны субстратов. Энантиоселективность. Энантиомерные и диастереомерные переходные состояния. Определения и примеры стереоселективных и стереоспецифических реакций.
8. Нуклеофильное замещение в ароматическом кольце. Механизм присоединения-отщепления (S_NAr), сравнение с реакциями нуклеофильного замещения при алифатическом атоме углерода. Анионные σ-комплексы Мейзенгеймера. Нуклеофилы, вступающие в реакцию S_NAr. Уходящие группы в реакциях S_NAr, порядок их реакционной способности. Активирующее влияние электроноакцепторных заместителей.
9. Пять типов механизмов реакций A_DE алкенов. Особенности их кинетики и стереохимии; примеры син- и анти-присоединения. Данные корреляционного анализа о природе переходного состояния на примере бромирования и гидроборирования замещенных стиролов. Реакции син- и анти-дигидроксилирования алкенов. Механизмы реакций Вагнера-Марковникова, Криге (включая реагент Майлса), Прево, Вудворда.
10. Нуклеофильное замещение в ароматическом кольце. Механизм отщепления-присоединения. Влияние заместителей на региоизбирательность замещения. Типы нуклеофилов и субстратов, способные реагировать по механизму отщепления-присоединения, относительная реакционная способность разных субстратов. Методы генерирования и фиксации дегидробензола.

11. Методы нуклеофильного замещения гидроксигруппы в спиртах. Роль и примеры формирования уходящей группы при взаимодействии спиртов с галогенидами серы и фосфора. Примеры реакций с сохранением и обращением конфигурации.
12. Электрофильное ароматическое замещение. Алкилирование аренов по Фриделю-Крафтсу. Алкилирующие агенты (спирты, алкены, алкилгалогениды). Механизм и селективность реакции. Типы переходных состояний. Побочные процессы: изомеризация алкилирующего реагента и продукта реакции, полиалкилирование и дезалкилирование.
13. Ароматические катионы и дикатионы. Примеры получения. Особенности строения. Гомоароматические ионы. ЯМР-Критерии ароматичности нейтральных молекул и ионов.
14. Металлоорганические соединения. Литий- и магнийорганические соединения: способы получения (восстановление галогенидов металлами, переметаллирование, обмен галогена на металл), реакционная способность по отношению к кислотам и электрофилам.
15. Методы активирования реакций алкенов со слабыми электрофилами: сульфенилхлоридами, хлорангидридами, хлорэтиловым эфиром, хлораминами, дисульфидами. Стереохимия реакций с циклогексеном и норборненом. Примеры трансформации аддуктов алкенов с иодизоцианатом и иодазидом.
16. Стереохимия бимолекулярного нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Примеры реакций, протекающих с обращением и сохранением конфигурации. Бимолекулярное нуклеофильное замещение у насыщенного атома углерода в реакциях с тионилхлоридом.
17. Механизмы реакций электрофильного ароматического замещения. Ранние и поздние переходные состояния. Данные о кинетическом изотопном эффекте, позиционной и субстратной селективности, корреляционного анализа о природе ПС.
18. Реакции нуклеофильного ароматического замещения, катализируемые соединениями меди и палладия. Схема каталитического цикла нуклеофильного замещения галогена в галогенаренах в присутствии меди (+1). Реакции Ульмана. Прямое замещение атома водорода в молекулах аренов и гетероаренов под действием нуклеофильных агентов. Представление о викариозном нуклеофильном замещении атома водорода, кинетический контроль. Реакция Чичибабина.
19. Реакции нуклеофильного замещения у алифатического атома углерода, протекающие с анхимерным содействием. Анхимерное содействие с участием гетероатомов, C=C-связи, арила, C-C- и C-H-связей. Кинетические и стереохимические признаки реакций с анхимерным содействием. Неклассические карбокатионы.
20. Ароматичность: общие представления. Правило Хюккеля. Диаграммы Фроста. Описание бензола в терминах ММО. Ароматичность аннуленов, их полициклических аналогов и гетероциклов. ЯМР как метод оценки ароматичности. Антиароматичность. Структурные особенности циклических полиенов.
21. Реакции нуклеофильного замещения гидроксигруппы в спиртах, протекающие с промежуточным образованием алкоксифосфониевых ионов. Покажите механизмы (включая стереохимию) реакций с применением PPh_3 и галогенпроизводных. Реакция Мицунобу.
22. Электрофильное ароматическое замещение. Общее представление о механизме реакций $\text{S}_\text{E}\text{Ar}$; роль π - и σ -комплексов. 4 типа переходных состояний в реакциях $\text{S}_\text{E}\text{Ar}$. Покажите, как различные факторы позволяют различать эти типы ПС. Приведите примеры.
23. Механизм $\text{S}_\text{N}1$ нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Нуклеофильность и ионизирующая способность растворителей. Уравнение Гронвальда-Уинштейна. Стереохимия реакций $\text{S}_\text{N}1$. Соотношение рацемизации и обращения конфигурации в реакциях $\text{S}_\text{N}1$. Механизм обращения конфигурации в $\text{S}_\text{N}1$.

24. Принцип линейности свободных энергий. Уравнения Гаммета и Тафта. Константы заместителей: σ , σ^+ , σ^- , σ^* , E_s ; их природа и способы определения. Примеры применения корреляционного анализа в изучении характера переходных состояний и интермедиатов в реакциях Ad_E , S_EAr , S_N2 .

8.3.2 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов. Экзаменационный билет содержит 2 вопроса и 4 задачи. 1 и 2 вопрос -10 баллов каждый, задачи по 5 баллов.

1. Реакции расширения и сужения циклов при генерации карбокатионов – перегруппировки Вагнера – Меервейна; реакции с сверхсильными кислотами, реакции сольволиза, дезаминирование первичных аминов. Перегруппировки Демьянова, Тиффено-Демьянова (семипинаколиновая). Карбанионные перегруппировки; перегруппировка Фаворского. Реакция расширения цикла при взаимодействии циклических кетонов с диазометаном или илидами серы.
2. Гидратация альдегидов и кетонов. Ацетали и тиоацетали; применение циклических ацеталей и их тиоаналогов в органическом синтезе. Синтезы на основе 1,3-дитианов. «Обращение полярности» карбонильной группы. Реакции с Н-нуклеофилами. Стереоселективность восстановления циклических и ациклических кетонов. Правило Крама.
3. Циклоалканы. Особенности пространственного и электронного строения малых и средних циклов, Методы синтеза; примеры именных реакций и перегруппировок.
4. Реакции с С-нуклеофилами. Получение циангидринов и синтезы на их основе. Реакции карбонильных соединений с реактивами Гриньяра; механизмы Ad_N и включающий стадию одноэлектронного переноса. Побочные превращения реактивов Гриньяра, обусловленные стерическими затруднениями в их реакциях с карбонильными соединениями. Стереохимия реакций карбонильных соединений с реактивами Гриньяра.
5. Строение гетероциклических аналогов циклоалканов. Аномерный эффект, его природа и примеры. Трансаннулярное перекрывание орбиталей и перегруппировки производных циклоалканов.
6. Реакции карбонильных соединений с С-нуклеофилами. Получение циангидринов и синтезы на их основе. Реакции карбонильных соединений с литийалканами; механизмы. Отличия от реакций карбонильных соединений с участием реактивов Гриньяра. Стереохимия реакций карбонильных соединений с литийалканами.
7. Электроциклические реакции. Орбитальная симметрия реагентов и стереоспецифичность электроциклических реакций. Примеры электроциклических реакций: 1,3-диены, 1,3,5-триены (и гетероатомные аналоги), заряженные частицы. Электроциклические реакции раскрытия циклов. Реакция Назарова.
8. СН-Кислотность органических соединений фосфора, серы и кремния и их применение в реакциях Ad_N . Реакции Виттига (и в модификации Шлоссера), Хорнера-Уодсворта-Эммонса, Кори-Чайковского, Жюлиа-Лижо, Жюлиа-Коцински, Петерсона; реагенты, особенности протоколов, стереохимия, синтезы Е- Z-алкенов и оксиранов. Кинетический и термодинамический контроль реакций олефинирования.
9. Алкилирование енолят-ионов: алкилирование альдегидов, карбоновых кислот, сложных эфиров, амидов и нитрилов. Стереохимия алкилирования. Стереоспецифичное алкилирование производных карбоновых кислот (N-ацилосазолидиноны как интермедиаты). Генерация и алкилирование дианионов. Внутримолекулярное алкилирование енолятов. Особенности реакций алкилирования енолят-ионов β -дикарбонильных соединений; влияние растворителя.
10. СН – Кислотность и кето-енольная таутомерия альдегидов и кетонов; влияние строения и растворителя. Условия термодинамического и кинетического контроля

процесса енолизации. Региоселективность и стереоселективность образования енолят-ионов из кетонов и сложных эфиров. Методы генерирования енолят-ионов: депротонирование карбонильного соединения, из силиловых эфиров енолов, из α,β – ненасыщенных кетонов. Влияние растворителя на строение и реакционную способность енолят-ионов.

11. Реакции расширения и сужения циклов при генерации карбокатионов – перегруппировки Вагнера – Меервейна; реакции с сверхсильными кислотами, реакции сольволиза, дезаминирование первичных аминов. Перегруппировки Демьянова, Тиффено-Демьянова (семипинаколиновая). Карбанионные перегруппировки; перегруппировка Фаворского. Реакция расширения цикла при взаимодействии циклических кетонов с диазометаном или илидами серы.

12. α,β – Ненасыщенные альдегиды и кетоны в реакциях с нуклеофилами; методы получения, механизмы их реакций прямого и сопряженного присоединения. Механизм присоединения по Михаэлю цианид-иона, металлоорганических соединений, аминов и енаминов (реакция Сторка), нитронат-ионов, триалкилборанов, силиловых эфиров енолят-ионов (реакция Мукайямы-Михаэля). Аннелирование по Робинсону.

13. Реакции нуклеофильного замещения у СО-группы. Основной, кислотный, нуклеофильный и внутримолекулярный нуклеофильный катализ этих реакций замещения.

14. Реакции альдольного присоединения и альдольной конденсации; механизмы основного и кислотного катализа. Перекрестные альдольные конденсации. Реакция Клайзена-Шмидта. Региоселективность и стереохимия направленного альдольного присоединения (directed aldol addition). Альдольное присоединение с участием енолятов бора, титана, силиловых эфиров энолов, катализируемое кислотами Льюиса (реакции Мукайямы). Внутримолекулярные альдольные конденсации.

15. Реакции Дильса-Альдера: стереохимия, эффект заместителей, катализ кислотами Льюиса. Типы смешивания граничных орбиталей: нормальное и обратное. Региоселективность и стереоспецифичность [4+2]-циклоприсоединения в реакциях несимметричных субстратов. Внутримолекулярные реакции Дильса-Альдера.

16. Реакции енольных форм сложных эфиров: сложноэфирная конденсация Клайзена, внутримолекулярная конденсация сложных эфиров (реакция Дикмана). Реакции Реформаторского, Дарзена. Конденсации Кневенагеля, Штоббе, Дебнера, Перкина. Реакции иминиевых ионов с енолами, енолятами бора, силиловыми эфирами енолов. Реакция Манниха.

17. Согласованные реакции. Концепция сохранения орбитальной симметрии и правила Вудворда—Гофмана. Реакции циклоприсоединения; классификация по числу электронов, по симметрии и геометрии перекрывания граничных орбиталей, участвующих в реакциях (σ - и π -, супра- и антараповерхностные); хелетропные реакции.

18. α,β – Ненасыщенные альдегиды и кетоны в реакциях с нуклеофилами; методы получения, механизмы их реакций прямого и сопряженного присоединения. Механизм присоединения по Михаэлю цианид-иона, металлоорганических соединений, аминов и енаминов (реакция Сторка), нитронат-ионов, триалкилборанов, силиловых эфиров енолят-ионов (реакция Мукайямы-Михаэля). Аннелирование по Робинсону.

1. Реакции Дильса-Альдера: стереохимия, эффект заместителей, катализ кислотами Льюиса. Типы смешивания граничных орбиталей: нормальное и обратное. Региоселективность и стереоспецифичность [4+2]-циклоприсоединения в реакциях несимметричных субстратов. Внутримолекулярные реакции Дильса-Альдера.

19. Ион-радикальные реакции кетонов и сложных эфиров. Реакция Буво-Блана. Пинаколиновая восстановительная димеризация кетонов. Ацилоиновая конденсация. Синтез макроциклов по Штолю-Прелогу. Диспропорционирование неенолизуемых альдегидов в реакции Каннищаро. Схемы три- и тетрамолекулярного механизмов: кинетика, изотопные эффекты, данные ор-анализа.

20. Реакции, протекающие с образованием свободных радикалов в качестве интермедиатов. Реакции радикального замещения (реакции S_R): галогенирование (реакция Воля-Циглера), окисление, сульфохлорирование, сульфоокисление, нитрозирование, нитрование. Реакции радикального присоединения (реакции Ad_R): присоединение галогеноводородов, галогенметанов, тиолов, тиокарбоновых кислот, Реакции присоединения к двойной $C=N$ связи. Перегруппировки и фрагментации свободных радикалов. Реакции замещения $S_{RN}1$.

21. Строение, термодинамическая и кинетическая кислотность нитросоединений. Роль основания и растворителя в процессах генерации нитронат-ионов. Реакции нитронат-ионов как C -нуклеофилов: галогенирование, нитрозирование, реакция Нефа. Таутомерия нитросоединений. Нитроальдольная конденсация (реакция Анри). Получение и трансформации нитроспиртов: восстановление нитрогруппы, окисление гидроксигруппы, получение нитроалкенов. Применение реакция Анри в синтезе природных соединений.

22. Генерация и строение карбенов; влияние заместителей на синглетное и триплетное состояния. Источники карбенов: разложение N -нитрозопроизводных амидов, мочевины, сульфонамидов; фотолиз диазиринов; окисление гидразонов; превращения сульфонилгидразонов; α -элиминирование галогеналканов. Реакции карбенов и карбеноидов (реагент Симмонса-Смита): реакции циклоприсоединения, реакции внедрения, перегруппировка Вольфа, реакция Арндта-Эйстерта (гомологизация карбоновых кислот, альдегидов и кетонов).

23. Реакции окисления функциональных групп. Окисление спиртов. Окисление двойных связей: получение эпоксидов и их реакции, расщепление двойных связей. Окисление кетонов и альдегидов. Окислительное расщепление при функциональных группах: расщепление гликолей, окислительное декарбоксилирование.

24. Литий- и магнийорганические соединения: способы получения (восстановление галогенидов металлами, переметаллирование, обмен галогена на металл). Реакционная способность литий- и магнийорганических соединений в реакциях с карбонильными соединениями.

25. Алкилирование енолят-ионов: алкилирование альдегидов, карбоновых кислот, сложных эфиров, амидов и нитрилов. Стереохимия алкилирования. Стереоспецифичное алкилирование производных карбоновых кислот (N -ацилзоксазолидиноны как интермедиаты). Генерация и алкилирование дианионов. Внутримолекулярное алкилирование енолятов. Особенности реакций алкилирования енолят-ионов β -дикарбонильных соединений; влияние растворителя.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (2 семестр).

Экзамен по дисциплине «*Органическая химия*» во 2 семестре и включает контрольные вопросы по разделу 1 рабочей программы дисциплины. Билет для **Экзамена** состоит из двух теоретических вопросов и четырех задач относящихся к разделу 1. Ответы на вопросы **экзамена** оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 10 баллов, второй – 10 баллов, каждая задача оценивается в 5 баллов.

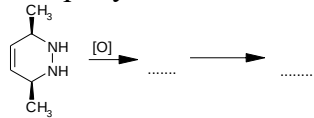
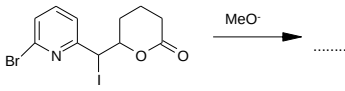
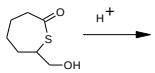
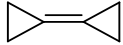
Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	Код и наименование направления подготовки Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
	Органическая химия
Билет № 1 1. Вопрос Реакции кислот и оснований в терминах теории МО. Зарядовый и орбитальный контроль органических реакций. Ион-радикалы – интермедиаты органических реакций. Расчетные и экспериментальные методы определения спиновой плотности в ион-радикалах. 2. Вопрос Реакции отщепления. Механизмы E1, E2 и E1CB. Пространственные и электронные эффекты заместителей в субстратах. Влияние свойств основания и условий проведения реакции на скорость и механизм реакции. Регио- и стереохимия реакций отщепления. Правила Зайцева и Гофмана. Условия, необходимые для протекания син-элиминирования. Конкуренция между реакциями элиминирования и нуклеофильного замещения. 3. Задача Сравните роль энтропийного фактора при ионизации сильных и слабых карбоновых кислот в воде. 4. Задача Объясните различие в значениях реакционных констант (0.03 и 2.7) двух реакционных серий: А) щелочной гидролиз этил-Х-бензоатов Б) кислотный гидролиз этил-Х-бензоатов 5. Задача Объясните знак и малую величину ρ гидроборирования п-Х-стиролов (-0.5). 6. Задача Сравните поведение реактивов Гриньяра и литийорганических реагентов в реакциях S_N2.	

8.5. Структура и примеры билетов для экзамена (3 семестр).

Экзамен по дисциплине «**Органическая химия**» в 3 семестре и включает контрольные вопросы по разделу 2 рабочей программы дисциплины. Билет для **Экзамена** состоит из из двух теоретических вопросов и четырех задач относящихся к разделу 1. Ответы на вопросы **экзамена** оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 10 баллов, второй – 10 баллов, каждая задача оценивается в 5 баллов.

Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__г	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	Код и наименование направления подготовки Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Органическая химия	
Билет № 1	
1. Вопрос Сигматропные перегруппировки; классификация по числу атомов в мигрирующем фрагменте и π –системе, по стереохимии (супра- и антараповерхностные, с сохранением и обращением конфигурации). [1,3]-, [1,5]- и [1,7] - сдвиги атомов водорода и алкильных групп. [3,3]-Сигматропные перегруппировки: Коупа, окси-Коупа, Клайзена, Айрленда-Клайзена.	
2. Вопрос Реакции конденсации карбонильных соединений с N-нуклеофилами. Механизмы синтеза (механизм Ad_N-E) и гидролиза соединений с кратной связью $C=N$. Зависимость скорости гидролиза от pH. Данные σ-анализа. Синтез енаминов; примеры применения енаминов в синтезе.	
3. Задача Завершите реакции, покажите стереохимию продукта 	
4. Задача Завершите реакцию, покажите механизм 	
5. Задача Завершите реакцию, покажите механизм 	
6. Задача Из ацетилциклопропана получите 	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин, Органическая химия, тт. 1-4, Москва, Изд-во «Бином», 2014, 567с., 623 с., 544 с. и 726 с.
2. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, Organic Chemistry, 2-d Edition, Oxford Univ. Press, 2012, 1234 p.

Б. Дополнительная литература

1. Травень, В.Ф. Органическая химия: учебное пособие для вузов: в 3 т. / В.Ф. Травень. – 2-е изд., испр.– Москва: Лаборатория знаний, 2016. Т. 1 – 368 с. Т. 2 – 517 с. Т. 3 – 388 с.
2. Дж.Дж. Ли, Именные реакции. Механизмы органических реакций, пер. с англ. Москва, Бином. Лаборатория знаний, 2006, 456 с.
3. Francis A. Carey, Richard J. Sundberg «Advanced Organic Chemistry», 5-е издание, 2008 Part A: Structure and Mechanisms. Part B: Reactions and Synthesis.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Реферативный журнал «Химия» (РЖХ)
- Реферативный журнал “Chemical Abstracts”
- Journal of the American Chemical Society
- Journal of Organic Chemistry
- Organic Letters
- Поисковая система органических реакций «Reaxis»

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция)

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Органическая химия» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы студента.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

Материально-техническое обеспечение лабораторного практикума по органической химии требует необходимого стандартного набора химической посуды, реактивов и лабораторного оборудования (электрические нагревательные приборы (плитки), магнитные мешалки, прибор для определения температуры плавления, рефрактометр, лабораторные весы, роторный испаритель, сушильный шкаф).

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде; кафедральная библиотека электронных изданий и диссертационных работ, выполненных аспирантами и сотрудниками кафедры, размещенные на сайте кафедры органической химии <http://organic.distant.ru/>.

13.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

14. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Теория строения органических соединений и механизмы органических реакций	<i>Знает:</i> фундаментальные теоретические представления органической химии – концепции строения органических соединений и механизмы органических реакций; <i>Умеет:</i> формировать стратегию синтеза сложных органических соединений, выбирать оптимальные пути синтеза; <i>Владеет:</i> теоретическими концепциями для предсказания и объяснения результатов органических реакций	Проверка домашних заданий, устный опрос на семинарских занятиях. Оценка за контрольные работы №1,2,3 (2 семестр) Оценка за экзамен (2 семестр)
Раздел 2. Реакции и методы	<i>Знает:</i> фундаментальные теоретические представления органической химии – концепции строения органических соединений и механизмы органических реакций; <i>Умеет:</i> формировать стратегию синтеза сложных органических соединений, выбирать оптимальные пути синтеза; <i>Владеет:</i> теоретическими концепциями для предсказания и объяснения результатов органических реакций	Проверка домашних заданий, устный опрос на семинарских занятиях. Оценка за контрольные работы №4,5,6 (3 семестр) Оценка за экзамен (3 семестр)

15. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

« _____ »

основной образовательной программы

« _____ »

код и наименование направления подготовки (специальности)

« _____ »

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Основы физики конденсированного состояния»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры Сколтеха к.ф.-м.н. Красиным А.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтех РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии»** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Основы физики конденсированного состояния»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области математики, теории вероятностей, общей физики, неорганической химии, информатики.

Цель дисциплины – продемонстрировать многообразие физических явлений, происходящих в конденсированной фазе вещества.

Задачи дисциплины

- научить оценивать характерные энергии, длины, времена релаксации различных физических взаимодействий;
- познакомить с основными объектами физики твердого тела кристаллического состояния – решеткой Браве, фононной и электронной подсистемами;
- дать обзор различных экспериментальных методик и теоретических описаний, исследующих твердое тело.

Дисциплина **«Основы физики конденсированного состояния»** преподается в 5 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6.Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономических и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами
			ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	
			ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- современные представления о кристаллических структурах,
- об экспериментальных методах их определения,
- о фононной и электронной подсистемах твердого тела,
- о классификации твердых тел;

Уметь:

- оценивать характерные параметры различных подсистем в конденсированной фазе,
- уметь ориентироваться в многообразии физических явлений конденсированного состояния;

Владеть:

- современными теоретическими методами описания взаимодействий атомов и электронов в кристалле;
- современными теоретическими представлениями о термодинамических, оптических и магнитных свойствах твердых тел,

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3.6	128	96
Лекции	1.8	64	48
Практические занятия (ПЗ)	1.8	64	48
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1.4	52	39
Контактная самостоятельная работа	1.4	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		52	39
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0.4	0.3
Подготовка к экзамену.		35.6	26.7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1 Кристаллические решетки и свойства кристаллов.	65	24	24	18
1.1	Кристаллические структуры.	11	4	4	3
1.2	Обратная решетка.	11	4	4	3
1.3	Типы связей в кристаллах.	11	4	4	3
1.4	Фононы как колебания кристаллической решетки.	11	4	4	3
1.5	Дефекты в кристаллах.	11	4	4	3
1.6	Тепловые свойства кристаллов	11	4	4	3
2.	Раздел 2. Электронные свойства твердого тела.	114	40	40	34
2.1	Металлическая связь.	11	4	4	3
2.2	Электрон в периодическом потенциале.	11	4	4	3
2.3	Метод сильной связи.	11,5	4	4	3,5
2.4	Полупроводники.	11,5	4	4	3,5
2.5	Контактные явления в полупроводниках.	11,5	4	4	3,5
2.6	Магнетизм.	11,5	4	4	3,5
2.7	Сверхпроводимость.	11,5	4	4	3,5
2.8	Оптические явления в кристаллах.	11,5	4	4	3,5
2.9	Учет взаимодействия электронов.	11,5	4	4	3,5
2.10	Теория функционала плотности.	11,5	4	4	3,5
	ИТОГО	180	64	64	52
	Экзамен	36			
	ИТОГО	216			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Кристаллические решетки и свойства кристаллов.

1.1. Кристаллические структуры.

Решетки Бравэ и их классификация. Элементарная ячейка, примитивная ячейка, ячейка Вигнера - Зейтца, базисные векторы. Примеры основных типов решеток, координационные сферы, коэффициент заполнения. Двумерные решетки. Оси симметрии и теория групп. Простые и сложные структуры. Основные типы структур однокомпонентных веществ (анализ структуры элементов периодической таблицы): ПК, ОЦК, ГЦК, ГПУ, структура алмаза. Построение их примитивных ячеек, расчет координационных чисел и радиусов первой координационной сферы.

1.2. Обратная решетка.

Базисные векторы, атомные плоскости, индексы Миллера. Первая зона Бриллюэна. Дифракция рентгеновских лучей и определение кристаллической структуры. Структурный фактор. Обратная решетка как следствие трансляционной инвариантности кристаллической структуры. Основные соотношения, связывающие параметры прямой и обратной решеток. Связь векторов обратной решетки с атомными плоскостями: построение плоскости по индексам Миллера и нахождение индексов Миллера плоскости, проходящей через заданные узлы решетки. Связь межплоскостного расстояния с длиной вектора обратной решетки. Выражение межплоскостных расстояний кубической решетки через индексы Миллера. Базисные векторы, первая зона Бриллюэна. Условие дифракции.

1.3. Типы связей в кристаллах.

Молекулярные, ковалентные и ионные кристаллы. Потенциал Леннарда - Джонса, когезионная энергия. Характеристики молекулярной, ионной, ковалентной и водородной связей, полупроводников, металлов и квантовых кристаллов. Потенциал Леннарда - Джонса, решеточные суммы, когезионная энергия.

1.4. Фононы как колебания кристаллической решетки.

Спектры фононов. Основные свойства фононных мод. Оптические, акустические ветви, поляризация. Способы определения спектров из взаимодействия с электромагнитной волной, из нейтронного рассеяния. Разложение потенциала взаимодействия атома/иона с решеткой вблизи положения равновесия: описание динамики решетки в гармоническом приближении. Фононы, акустические и оптические ветви. Фононный спектр одномерной цепочки, закон дисперсии.

1.5. Дефекты в кристаллах.

Дефекты по Шоттки и по Френкелю. F - центры. Дефекты в ионных кристаллах. Дислокации. Поляроны и экситоны. Равновесные концентрации дефектов по Шоттки и по Френкелю. Независимость энергии точечного дефекта от положения в идеальном кристалле. Диффузия дефектов. Центры окраски в ионных кристаллах. Механизм образования и диффузии F-центров.

1.6. Тепловые свойства кристаллов.

Модель Дебая и Эйнштейна. Проблемы классической модели. Теплоемкость и способы ее определения. Вклад электронной подсистемы. Решеточная теплопроводность кристаллов. Тепловое расширение. Параметры Грюнайзена. Энергия колебаний решетки в приближении независимых классических осцилляторов. Энергия колебаний решетки в приближении независимых квантовых осцилляторов. Вычисление температурной зависимости теплоемкости в модели Эйнштейна, высокотемпературный и низкотемпературный пределы. Применение модели Эйнштейна для описания теплоемкости оптических мод колебаний. Энергия колебаний решетки в модели Дебая.

Раздел 2. Электронные свойства твердого тела.

2.1. Металлическая связь.

Свободный электронный газ. Статистика Ферми - Дирака. Плотность электронных состояний. Уровень Ферми. Средняя энергия электронов. Теплоемкость. Физические

причины слабого затухания низкотемпературной теплоемкости металла. Статистика фононов и электронов. Химический потенциал электронов. Квазичастица «свободный электрон», ее эффективная масса, изотропный металл. Плотность электронов в металлах. Поверхность Ферми. Энергия Ферми, средняя энергия, скорость Ферми и их зависимость от концентрации электронов. Кратность вырождения электронных состояний. Вывод формулы для теплоемкости металла. Плотность состояний на поверхности Ферми. Температурная зависимость химического потенциала. Аналитические выражения и оценки величин для изотропного металла.

2.2. Электрон в периодическом потенциале.

Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна. Плотность состояний. Слабый периодический потенциал. Энергетические зоны, дисперсия и энергетическая щель. Расширенная, повторяющаяся и приведенная зонные схемы при квазипараболическом законе дисперсии. Принцип заполнения электронных состояний и заполнение зон квадратной решетки. Построение четырех первых зон Бриллюэна. Эволюция вида поверхности Ферми в зависимости от количества электронов, электронные и дырочные зоны. Теорема Латтинжера.

2.3. Метод сильной связи.

Локализованные состояния. Функции Ванье. Зонная структура. Функции Ванье. Закон дисперсии невзаимодействующих электронов на различных решетках.

2.4. Полупроводники.

Собственные полупроводники: концентрация электронов и дырок, положение уровня Ферми, подвижность носителей. Примесные полупроводники: температурная зависимость концентрации носителей, примесная зона, полуметаллические состояния, прямые и не прямые переходы. Симметрия зоны Бриллюэна и количество долин в кремнии и германии, эффективные массы носителей в долинах и валентных зонах. Прямозонные и непрямозонные полупроводники. Плотность состояний в валентной зоне и зоне проводимости. Ширина запрещенной зоны кремния и германия и ее температурная зависимость. Расчет концентрации собственных носителей в германии. Сравнение собственной проводимости германия и кремния с проводимостью металлов. Легированные полупроводники. Донорные и акцепторные примеси, мелкие и глубокие примесные уровни, характерные глубины залегания однозарядных примесных уровней в германии и кремнии. Полупроводники p и n типа, компенсированные полупроводники.

2.5. Контактные явления в полупроводниках.

Контактная разность потенциала. Генерация, диффузия и дрейф в примесном полупроводнике. Соотношения Эйнштейна. p-n-переход. Оценка основных характеристик p-n-перехода: величины потенциального барьера, ширины двойного обедненного слоя, напряженности поля в обедненном слое, емкости перехода. Инжекция и экстракция. Лавинный пробой. Световая генерация и рекомбинация носителей в p-n-переходах. Светодиод: соотношение между излучаемой энергией и выделяемым теплом, между длиной волны излучения и масштабом напряжения на переходе. Полупроводниковый лазер.

2.6. Магнетизм.

Диамагнетизм и парамагнетизм. Магнитное дипольное взаимодействие. Модель Гейзенберга. Магнитное упорядочение. Ферро- и антиферромагнетики. Домены. Ферро- и антиферромагнитное упорядочение. Спиновые волны. Модель Изинга.

2.7. Сверхпроводимость.

Критическая температура, критический ток. Магнитные свойства. Сверхпроводящая щель. Уравнение Лондонов, теория БКШ и теория Гинзбурга – Ландау. Уперовские пары. Размер куперовской пары, энергия связи. Параметр порядка и критическая температура.

2.8. Оптические явления в кристаллах.

Прямые и не прямые переходы. Экситонное поглощение. Фотопроводимость, люминесценция, флуоресценция. Спектр поглощения света. Собственное поглощение при

прямых и не прямых переходах: край поглощения, зависимость коэффициента поглощения от энергии. Спектры экситонного поглощения. Зависимость фото-ЭДС и тока короткого замыкания от величины поля и интенсивности излучения. Люминесценция и люминофоры. Классификация люминесценции по типу возбуждения, длительности свечения и механизму элементарных процессов.

2.9. Учет взаимодействия электронов.

Задача многих тел. Общий гамильтониан. Различные приближения. Сильно коррелированные системы. Общий гамильтониан. Метод вторичного квантования. Модель Хаббарда.

2.10. Теория функционала плотности.

Функционалы. Уравнения Кона – Шэма, методы решения. Псевдопотенциалы. Примеры современных вычислений. Функционалы и их производные. Теорема Хоэнберга – Кона. Лестница аппроксимаций.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	
	Знать:			
1	– современные представления о кристаллических структурах,	+		
2	– об экспериментальных методах их определения,		+	
3	– о фононной и электронной подсистемах твердого тела,		+	
4	– о классификации твердых тел,	+		
	Уметь:			
5	– оценивать характерные параметры различных подсистем в конденсированной фазе,		+	
6	– уметь ориентироваться в многообразии физических явлений конденсированного состояния;	+		
	Владеть:			
7	– современными теоретическими методами описания взаимодействий атомов и электронов в кристалле;	+		
8	– современной теорией термодинамических, оптических и магнитных свойств твердых тел,		+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>				
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК		
9	ПК-6.Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+
		ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+
		ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Структура кристаллов.	4
2	1	Обратная решетка.	4
3	1	Типы связей в кристаллах.	4
4	1	Колебания кристаллической решетки.	4
5	1	Дефекты в кристаллах.	4
6	1	Тепловые свойства кристаллов.	4
7	2	Металлическая связь. Теплоемкость металла.	4
8	2	Электрон в периодическом потенциале.	4
9	2	Метод сильной связи.	4
10	2	Полупроводники.	4
11	2	Контактные явления в полупроводниках.	4
12	2	Магнетизм.	4
13	2	Сверхпроводимость.	4
14	2	Оптические явления в кристаллах.	4
15	2	Учет взаимодействия электронов.	4
16	2	Теория функционала плотности.	4

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторные занятия по дисциплине «Основы физики конденсированного состояния» не предусмотрены.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *экзамена* (5 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме **экзамена** (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы 60 (5 семестр) составляет по 30 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1.

1. Рассчитать первое, второе и третье координационные числа для гранецентрированной кубической решетки.
2. Рассчитать базис обратной решетки и определить ее тип, если базис прямой решетки следующий: $a_1 = \{0,0,1\}$; $a_2 = \{0,1/2,1/2\}$; $a_3 = \{1/2,0,1/2\}$.
3. Рассчитать фоновый спектр одномерной цепочки с чередующимися атомами разной массы.
4. Рассчитать амплитуду рассеяния в двухатомной одномерной структуре. Выделить структурный фактор в амплитуде рассеяния.

Оценка заданий:

№ задания	1	2	3	4	Σ
Оценка, балл	8	8	8	6	30

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2.

1. Рассчитать аналитически дисперсию свободных электронов на прямоугольной решетке.
2. Рассчитать аналитически фоновый спектр для двухатомной одномерной цепочки.
3. Рассчитать численно и проследить эволюцию плотности состояний свободных электронов на простой кубической решетке с увеличением размерности решетки.
4. Построить зонную структуру для решетки графена.

Оценка заданий:

№ задания	1	2	3	4	Σ
Оценка, балл	8	8	8	6	30

8.3. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (5 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1 и 2 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Решетки Бравэ и их классификация. Элементарная ячейка, примитивная ячейка, ячейка Вигнера - Зейтца, базисные векторы. Примеры основных типов решеток,

- координационные сферы, коэффициент заполнения. Двумерные решетки. Оси симметрии и теория групп.
2. Базисные векторы, атомные плоскости, индексы Миллера. Первая зона Бриллюэна. Дифракция рентгеновских лучей и определение кристаллической структуры. Структурный фактор.
 3. Молекулярные, ковалентные и ионные кристаллы. Потенциал Леннарда - Джонса, когезионная энергия.
 4. Спектры фононов. Основные свойства фононных мод. Оптические, акустические ветви, поляризация. Способы определения спектров из взаимодействия с электромагнитной волной, из нейтронного рассеяния.
 5. Дефекты по Шоттки и по Френкелю. F - центры. Дефекты в ионных кристаллах. Дислокации. Поляроны и экситоны.
 6. Модель Дебая и Эйнштейна. Проблемы классической модели. Теплоемкость и способы ее определения. Вклад электронной подсистемы. Решеточная теплопроводность кристаллов. Тепловое расширение. Параметры Грюнайзена.
 7. Свободный электронный газ. Статистика Ферми - Дирака. Плотность электронных состояний. Уровень Ферми. Средняя энергия электронов. Теплоемкость.
 8. Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна. Плотность состояний. Слабый периодический потенциал. Энергетические зоны, дисперсия и энергетическая щель.
 9. Локализованные состояния. Функции Ванье. Зонная структура.
 10. Собственные полупроводники: концентрация электронов и дырок, положение уровня Ферми, подвижность носителей. Примесные полупроводники: температурная зависимость концентрации носителей, примесная зона, полуметаллические состояния, прямые и не прямые переходы.
 11. Контактная разность потенциала. Генерация, диффузия и дрейф в примесном полупроводнике. Соотношения Эйнштейна. p - n -переход.
 12. Диамагнетизм и парамагнетизм. Магнитное дипольное взаимодействие. Модель Гейзенберга. Магнитное упорядочение. Ферро- и антиферромагнетики. Домены.
 13. Критическая температура, критический ток. Магнитные свойства. Сверхпроводящая щель. Уравнение Лондонов, теория БКШ и теория Гинзбурга – Ландау.
 14. Прямые и не прямые переходы. Экситонное поглощение. Фотопроводимость, люминесценция, флуоресценция.
 15. Задача многих тел. Общий гамильтониан. Различные приближения. Сильно коррелированные системы.
 16. Функционалы. Уравнения Кона – Шэма. Псевдопотенциалы. Примеры современных вычислений.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (5 семестр).

Экзамен по дисциплине «*Основы физики конденсированного состояния*» проводится в 5 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1 и 2 рабочей программы дисциплины. Билет для **Экзамена** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

<i>«Утверждаю»</i> Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Основы физики конденсированного состояния Билет № 1 1 Электрон в периодическом потенциале. 2. Модель Изинга.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1 А. Основная литература

1. Байков Ю.А., Кузнецов В.М. Физика конденсированного состояния: учебное пособие. Лаборатория знаний, 2020.
2. Федоров Б.В., Нерадовский Д.Ф. Элементы физики твердого тела. Тюменский индустриальный университет, 2012.

Б. Дополнительная литература

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
2. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979, тт. 1, 2.
3. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974.
4. Маделунг О. Теория твердого тела. М.: Наука, 1980.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

Научно-технические журналы:

- Реферативный журнал «Физика» (РЖФ) ISSN 0869-5873;
- «Физика твердого тела» ISSN 0367-3294;
- Политематические базы данных (БД):

США: CAPLUS; COMPENDEX;

- Великобритания: INSPEC;
- Франция: PASCAL.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

- При переходе на ЭО и ДОТ:
— сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Основы физики конденсированного состояния*» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

- Учебная аудитория для проведения лекционных и практических занятий, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.
- Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с выходом в Интернет и доступом к базам данных.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Кристаллические решетки и свойства кристаллов.	<i>Знает:</i> – современные представления о кристаллических структурах, – о классификации твердых тел; <i>Умеет:</i> – уметь ориентироваться в многообразии физических явлений конденсированного состояния; <i>Владеет:</i> – современными теоретическими методами описания взаимодействий атомов и электронов в кристалле;	Оценка за контрольную работу №1 (_ 5 семестр) Оценка за экзамен (5 семестр)
Раздел 2. Электронные свойства твердого тела.	<i>Знает:</i> – об экспериментальных методах их определения, – о фононной и электронной подсистемах твердого тела, <i>Умеет:</i> – оценивать характерные параметры различных подсистем в конденсированной фазе, <i>Владеет:</i> – современными теоретическими представлениями о термодинамических, оптических и магнитных свойствах твердых тел,	Оценка за контрольную работу №2 (5 семестр) Оценка за экзамен (5 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Основы химии и физики высокомолекулярных соединений»**

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена :

д.х.н., профессор, заведующий кафедрой биоматериалов М.И. Штильман

д.х.н., доцент, профессор кафедры биоматериалов Я.О. Межуев

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтех РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 6

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направления подготовки **04.03.01 Химия**, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестров.

Дисциплина **«Основы химии и физики высокомолекулярных соединений»** относится к основной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области ...

Цель дисциплины – знакомство студентов с наукой о высокомолекулярных соединениях, с основами способов и методов синтеза и модификации полимеров, изучения их физико-химических и физико-механических свойств, с химическими реакциями макромолекул, с корреляцией механических свойств и структуры полимеров и материалов на их основе, веществ полимерной природы.

Задачи дисциплины

– получение студентом навыков освоения и критического анализа теоретического и экспериментального материала

– овладение базовыми информационными и инструментальными технологиями.

Дисциплина **«Основы химии и физики высокомолекулярных соединений»** преподается в 6 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- Методы синтеза полимеров основными методами полимеризации
- Особенности химических реакций с участием макромолекул
- Способы очистки полимеров от низкомолекулярных и иных примесей в процессах их получения или модификации
- Основные типы полимеров для медико-биологического применения, включая новые типы полимеров со специфическими свойствами

Уметь:

- Перечислить основные методы синтеза и химические структуры получаемых полимеров
- Написать основные реакции химической с участием макромолекул и конечные структуры модифицированных полимеров

Владеть:

- Современными представлениями в области химии высокомолекулярных соединений

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	
Самостоятельная работа	1,2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,2	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43,6	32,7
Вид итогового контроля:	зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лекции	Прак. зан.	Лаб. работы	Сам. работа
1.	Раздел 1. Общие представления о полимерах	93	32	32	-	29
1.1	Определение понятия полимер, мономер, структурное повторяющееся звено	4	2	2	-	2
1.2	Основные отличия процессов полимеризации протекающих по ступенчатому и цепному механизмам	4	2	2	-	2
1.3	Природа радикальной цепной полимеризации и структурная организация макромолекул	4	2	2	-	2
1.4	Значения констант и энергетика радикальной полимеризации	8	4	4	-	3
1.5	Полимеры с системой сопряженных двойных связей – новый класс биологически инертных веществ для целей медико-биологического применения	4	2	2	-	2
1.6	Катионная полимеризация мономеров, содержащих двойную углерод-углеродную связь	4	2	2	-	2
1.7	Анионная полимеризация мономеров с двойной углерод-углеродной связью	4	2	2	-	2

1.8	Влияние полярности и сольватирующей способности среды на механизм и кинетику анионной полимеризации	8	4	4	-	3
1.9	Стереохимия процессов полимеризации и катализаторы Циглера-Натта	4	2	2	-	2
1.10	Понятие о реакции метатезиса линейных олефинов и циклоолефинов	4	2	2	-	2
1.11	Значение термодинамических параметров и полимеризация	4	2	2	-	2
1.12	Циклические мономеры и виды полимеризационных процессов, протекающих с раскрытием цикла	4	2	2	-	3
1.13	Общее рассмотрение цепной сополимеризации	8	4	4	-	2
2.	Раздел 2. Ступенчатые процессы синтеза макромолекул	43,5	16	16	-	11,5
2.1	Ступенчатая реакция синтеза полимеров с выделением побочного продукта и без его образования	16	8	8	-	5,75
2.2	Кинетика автокатализируемой и катализируемой ступенчатой полимеризации и характер изменения молекулярной массы	16	8	8	-	5,75
3.	Раздел 3. Реакции с участием макромолекул	43,5	16	16	-	11,5
3.1	Основные типы реакций полимеров, протекающие с участием полимерной цепи и боковых групп	16	8	8	-	5,75
3.2	Реакции модификации синтетических и природных полимеров, затрагивающие боковые группы	16	8	8	-	5,75
	ИТОГО	180	64	64	-	52

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Цепные процессы синтеза макромолекул

1.1. Определение понятия полимер, мономер, структурное повторяющееся звено.

Способы изображения полимерных молекул. Три основных отличия полимеров: цепная структура, наличие в цепи повторяющихся звеньев или цепных фрагментов, наличие высокой молекулярной массы. Молекулярный вес, полидисперсность и молекулярно-массовое распределение полимеров (ММР). Методы усреднения молекулярного веса полимеров. Примеры природных, синтетических и искусственных полимеров. Номенклатура и классификация полимеров. Основные способы получения синтетических полимеров из низкомолекулярных веществ (мономеров) методами ступенчатой и цепной полимеризации или химическим воздействием на исходные полимеры.

1.2. Основные отличия процессов полимеризации протекающих по ступенчатому и цепному механизмам.

Типы мономеров склонных к реакциям цепной полимеризации. Цепная полимеризация виниловых мономеров, инициируемая активными центрами радикального, катионного или анионного характера. Образование высокомолекулярных полимеров на начальной стадии по реакции активного центра растущей цепи с мономером и наличие обрыва цепи как основные характеристики цепной полимеризации. Влияние заместителя при двойной углерод-углеродной связи мономера на способность к полимеризации под влиянием различных типов активных центров. Первичная и вторичная структура полимерной цепи, понятие о стереорегулярности.

1.3. Природа радикальной цепной полимеризации и структурная организация макромолекул.

Мономеры, применяемые для радикальной полимеризации. Инициаторы и рост цепи при свободно-радикальной полимеризации, кинетическое описание процесса. Пути обрыва цепи при радикальной полимеризации, кинетическая длина цепи, молекулярный вес и молекулярно-массовое распределение.

1.4. Значения констант и энергетика радикальной полимеризации.

Передача цепи при радикальной полимеризации, применение передатчиков для регулирования молекулярной массы, теломеризация. Передача цепи на полимер и возникновение разветвленных полимеров. Ингибирование и торможение полимеризации, типы ингибиторов и замедлителей. Автоингибирование при полимеризации аллильных мономеров. Способы проведения радикальной полимеризации и их характеристика. Полимеры, получаемые по реакции радикальной полимеризации.

1.5. Полимеры с системой сопряженных двойных связей – новый класс биологически инертных веществ для целей медико-биологического применения.

Получение полианилина, полипиррола и политиофена методами окислительной полимеризации исходных насыщенных мономеров. Электронное строение и специфические свойства таких полимеров и их использование в качестве материалов для имплантатов, искусственных мышц и высокочувствительных биосенсоров.

1.6. Катионная полимеризация мономеров, содержащих двойную углерод-углеродную связь.

Влияние заместителей в молекулах мономеров на их склонность к катионной полимеризации. Способы инициирования катионной полимеризации. Рост и обрыв цепи при катионной полимеризации. Упрощенная кинетическая схема катионной полимеризации и энергетические характеристики процесса. Влияние полярности и сольватирующей способности среды на механизм и кинетику катионной полимеризации. Трудности при интерпретировании кинетических исследований, роль контактных ионных пар и свободных катионов в реакции полимеризации и значения констант инициирования и роста. Передача цепи на мономер и полимер и ММР полимеров, получаемых при катионной полимеризации. Промышленные полимеры, получаемые по реакции катионной полимеризации.

1.7. Анионная полимеризация мономеров с двойной углерод-углеродной связью.

Влияние заместителей в молекулах мономеров на их склонность к анионной полимеризации. Способы инициирования анионной полимеризации. Кинетика анионной полимеризации на свободных ионах, рост и обрыв (передача) кинетической цепи. Стереорегулирование при анионной полимеризации виниловых и диеновых мономеров на алкилах лития. Безобрывная полимеризация, скорость и длина кинетической цепи при безобрывной полимеризации.

1.8. Влияние полярности и сольватирующей способности среды на механизм и кинетику анионной полимеризации.

Сольватно-разделенные и контактные ионные пары. Молекулярная масса и молекулярно-массовое распределение полимеров, получаемых в отсутствие реакций обрыва. Значения констант роста и энергетика процессов при безобрывной полимеризации. Явление ассоциации при инициировании живой полимеризации алкилами лития. Получение диблочных, полиблочных, привитых, гребне- и звездообразных сополимеров. Морфологические особенности на границах раздела фаз блок- и привитых сополимеров.

1.9. Стереохимия процессов полимеризации и катализаторы Циглера-Натта.

Анионно-координационная полимеризация. Образование активных центров, инициирование, рост и обрыв (передача) цепи на комплексных координационных катализаторах. Кинетические особенности полимеризации на таких катализаторах. Стереоспецифическая полимеризация α -олефинов и вероятные механизмы стереорегулирования. Получение стереорегулярных полимеров бутадиена и изопрена на катализаторах типа Циглера-Натта и металлалкилах. Механизм стереорегулирования при полимеризации сопряженных диенов. Оптически активные полимеры. Статистические модели роста цепи. Промышленные полимеры, получаемые на комплексных координационных катализаторах.

1.10. Понятие о реакции метатезиса линейных олефинов и циклоолефинов.

Метатезис, протекающей под действием комплексных катализаторов на основе W, Mo, Ru через стадию полного разрыва двойных углерод-углеродных связей и их последующей регенерации. Сохранение неизменного числа двойных связей в реакционной системе – уникальная особенность полимеризации циклоолефинов под влиянием катализаторов метатезиса. Механизм и цепной характер реакции метатезиса линейных и циклических олефинов. Образование активных металл-карбеновых комплексов, инициирование, рост и обрыв (передача) цепи при метатезисной полимеризации циклоолефинов. Молекулярная масса и ММР полимеров циклоолефинов. Термодинамика процессов полимеризации циклоолефинов, протекающей с раскрытием цикла. Межмолекулярные и внутримолекулярные обменные реакции в процессах роста цепи. Критическая концентрация и циклодеструкция ненасыщенных карбоциклических полимеров. Получение электропроводящего полиацетилена метатезисной полимеризацией циклооктатетраена. Полимеры циклоолефинов (полиалкенамеры), получаемые на комплексных катализаторах по реакции метатезиса.

1.11. Значение термодинамических параметров и полимеризация.

Влияние строения исходного мономера на его способность к полимеризации. Энергии связей и теплоты полимеризации мономеров, содержащих двойные и тройные

связи. Энтальпия, энтропия и энергия Гиббса в процессах полимеризации алкенов. Общее рассмотрение способности мономеров к полимеризации на основе значений термодинамических параметров. Термодинамический запрет на полимеризацию некоторых мономеров. Влияние заместителей при двойной связи на полимеризацию алкенов. Понятие о верхней и нижней предельной температуре полимеризации, термодинамическая и кинетическая нестабильность полимеров. Полимеризационно-деполимеризационное равновесие и методы определения термодинамических величин.

1.12. Циклические мономеры и виды полимеризационных процессов, протекающих с раскрытием цикла.

Термодинамика полимеризации с раскрытием цикла лактамов, лактонов, простых циклических эфиров, циклопарафинов. Метатезисная полимеризация циклоолефинов и циклодиенов с раскрытием цикла. Равновесная полимеризация циклопентена. Механизм анионной полимеризации лактамов, лактонов, эпоксидов и циклосилоксанов. Катионная полимеризация лактонов и иных кислородсодержащих циклов. Полиорганосфазены, полимерная сера и селен.

1.13. Общее рассмотрение цепной сополимеризации.

Типы сополимеров – статистические, чередующиеся, блок- и привитые сополимеры. Уравнения зависимости состава сополимера от исходной смеси сомономеров (Уолл, Уоллинг). Относительные активности мономеров в процессах сополимеризации. Типы сополимеризационных процессов – идеальная, чередующаяся, микроблочная. Изменение состава сополимеров во времени при различных степенях конверсии. Резонансные и полярные эффекты и их роль при сополимеризации. Q–e схема и эмпирические подходы к оценке активности сомономеров. Катионная, анионная и координационная сополимеризация алкеновых и диеновых мономеров и их применение на практике. Методы определения относительных активностей сомономеров.

Раздел 2. Ступенчатые процессы синтеза макромолекул.

2.1. Ступенчатая реакция синтеза полимеров с выделением побочного продукта и без его образования.

Рост цепи через стадию образования олигомеров и отсутствие обрыва (сохранение активных центров) как основная особенность ступенчатой полимеризации. Молекулярная масса, полидисперсность и наиболее вероятное молекулярно-массовое распределение Флори. Межмолекулярные и внутримолекулярные реакции в процессе роста и их влияние на характер ММР, образование циклических продуктов путем циклодеструкции и критическая концентрация реакционной среды.

2.2. Кинетика автокатализируемой и катализируемой ступенчатой полимеризации и характер изменения молекулярной массы.

Влияние избытка реагентов и монофункциональных добавок на молекулярную массу полимера. Трехмерная полимеризация и модифицированное уравнение Карозерса, функция ММР для случая нелинейной ступенчатой полимеризации. Равновесная полимеризация в закрытых и открытых системах, влияние остаточного побочного продукта реакции на молекулярную массу полимера. Механизмы реакций ступенчатой полимеризации. Соплимеризация по ступенчатому механизму. Методы проведения

полимеризации в расплаве и растворе, особенности межфазной полимеризации. Полимеры, получаемые по реакциям ступенчатой полимеризации.

Раздел 3. Реакции с участием макромолекул

3.1. Основные типы реакций полимеров, протекающие с участием полимерной цепи и боковых групп.

Особенности реакций полимерных молекул. Влияние локальной концентрации функциональных групп, стерические и электростатические эффекты. Реакции модификации синтетических и природных полимеров, затрагивающие полимерную цепь. Хлорирование и сульфохлорирование полиэтилена, гидрирование, галогенирование и гидрогалогенирование синтетических и природных каучуков. Создание сетчатых структур на основе насыщенных полиуглеводородов, натуральных и синтетических каучуков. Получение полиацетилена и его производных по реакции дегидрогалогенирования поливинилгалогенидов. Дегидрофторирование поливинилиденфторида – путь синтеза линейной формы углерода, карбина.

3.2. Реакции модификации синтетических и природных полимеров, затрагивающие боковые группы.

Промышленное получение поливинилового спирта гидролизом поливинилацетата. Целлюлоза и ее производные, получение поливинилбутираля, гидролиз полиметилметакрилата и полиакриламида. Термическая деструкция полимеров, получение черного орлона термической обработкой полиакрилонитрила. Полимеры в роли носителей, полимерные реагенты, катализаторы и субстраты.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	
	Знать:				
1	– Методы синтеза полимеров основными методами полимеризации	+	+		
2	– Особенности химических реакций с участием макромолекул			+	
3	– Способы очистки полимеров от низкомолекулярных и иных примесей в процессах их получения или модификации	+	+	+	
3	– Основные типы полимеров для медико-биологического применения, включая новые типы полимеров со специфическими свойствами	+	+	+	
	Уметь:				
3	– Перечислить основные методы синтеза и химические структуры получаемых полимеров	+	+	+	
4	– Написать основные реакции химической с участием макромолекул и конечные структуры модифицированных полимеров			+	
	Владеть:				
5	– Современными представлениями в области химии высокомолекулярных соединений			+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>универсальные и общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>					
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК			
7	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;	+	+	+
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК			
9	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материа-лов	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1.1	Определение понятия полимер, мономер, структурное повторяющееся звено	2
2	1.2	Основные отличия процессов полимеризации протекающих по ступенчатому и цепному механизмам	2
3	1.3	Природа радикальной цепной полимеризации и структурная организация макромолекул	2
4	1.4	Значения констант скоростей и энергетика радикальной полимеризации	2
5	1.5	Полимеры с системой сопряженных двойных связей – новый класс биологически инертных веществ для целей медико-биологического применения	4
6	1.6	Катионная полимеризация мономеров, содержащих двойную углерод-углеродную связь	2
7	1.7	Анионная полимеризация мономеров с двойной углерод-углеродной связью	2
8	1.8	Влияние полярности и сольватирующей способности среды на механизм и кинетику анионной полимеризации	4
9	1.9	Стереохимия процессов полимеризации и катализаторы Циглера-Натта	2
10	1.10	Понятие о реакции метатезиса линейных олефинов и циклоолефинов	2
11	1.11	Значение термодинамических параметров и полимеризация	2
12	1.12	Циклические мономеры и виды полимеризационных процессов, протекающих с раскрытием цикла	2
13	1.13	Общее рассмотрение цепной сополимеризации	4
14	2.1	Ступенчатая реакция синтеза полимеров с выделением побочного продукта и без его образования	8
15	2.2	Кинетика автокатализируемой и катализируемой ступенчатой полимеризации и характер изменения молекулярной массы	8
16	3.1	Основные типы реакций полимеров, протекающие с участием полимерной цепи и боковых групп	8
17	3.2	Реакции модификации синтетических и природных полимеров, затрагивающие боковые группы	8

6.2 Лабораторные занятия

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины «**Основы химии и физики высокомолекулярных соединений**» предусмотрена самостоятельная работа студента бакалавриата в объеме 52 ч в 6 семестре плюс 36 ч (подготовка к зачёту). Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- анализ материала аудиторных занятий;
- работу с учебной и научной литературой;
- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **зачёта с оценкой** (6 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), реферативной работы (максимальная оценка 20 баллов) и итогового контроля в форме **зачёта с оценкой** (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

1. Принципы разделения методов синтеза полимеров на ступенчатые и цепные. Сравнительные характеристики и мономеры для этих видов полимеризации.
2. Особенности цепной свободно-радикальной полимеризации, мономеры для радикальной полимеризации, кинетика и механизм. Промышленно важные процессы радикальной полимеризации.
3. Мономеры для катионной полимеризации. Инициаторы полимеризации, кинетика и механизм. Промышленно важные процессы катионной полимеризации.
4. Мономеры для анионной полимеризации. Инициаторы полимеризации, кинетика и механизм. Безобрывная полимеризация на литийалкилах. Промышленно важные процессы катионной полимеризации.
5. Комплексные металлоорганические катализаторы типа Циглера-Натта и стереоспецифическая полимеризация олефинов. Катализаторы нового поколения и синтез поли- α -олефинов. Промышленно важные процессы анионно-координационной полимеризации.
6. Особенности реакции метатезиса линейных и циклических олефинов, кинетика, термодинамика и механизм метатезисной полимеризации. Промышленный синтез полимеров циклоолефинов.
7. Способы проведения окислительной полимеризации ароматических и гетероциклических соединений. Электропроводящие полимеры и их возможное применение для медико-биологических целей.

8. Общие принципы, энтальпия и энтропия цепной полимеризации ненасыщенных и циклических мономеров, полимеризационно-деполимеризационное равновесие.
9. Особенности цепной сополимеризации ненасыщенных и циклических мономеров относительная активность сомономеров, ее влияние на состав сополимеров и методы определения. Промышленно важные сополимеры.
10. Ступенчатая полимеризация – построение макромолекул путем химических реакций бифункциональных соединений (мономеров)
11. Равновесие при ступенчатой полимеризации, ее кинетические особенности, регулирование молекулярной массы и промышленно важные полимеры.
12. Реакции полимеров с участием основных макромолекул (гидрирование, дегидрирование, дегало- и дегидрогалогенирование, термические и химические разрывы макромолекул).
13. Полимераналогичные превращения исходных синтетических и природных полимеров за счет реакций с участием боковых функциональных групп. Промышленно важные полимеры, получаемые по реакциям с участием макромолекул.
14. Методы расчета кинетики реакции метатезиса.
15. Методы расчета кинетики реакции гетерогенной ионно-координационной полимеризации на катализаторах Циглера-Натта.
16. Методы расчета кинетики гомогенной ионно-координационной полимеризации.
17. Молекулярно-массовое распределение до глубоких конверсий. Методы расчета.
18. Аналитические функции молекулярно-массового распределения и области их применения.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 4 контрольных работ. (две контрольных работы в 1 разделе и по одной – во 2 и в 3 разделах). Максимальная оценка за контрольные работы составляет по 10 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

Стереоспецифическая полимеризация α -олефинов и вероятные механизмы стереорегулирования.

Вопрос 1.2.

Получение стереорегулярных полимеров бутадиена и изопрена на катализаторах типа Циглера-Натта и металлалкилах.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 10 баллов. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

Механизм стереорегулирования при полимеризации сопряженных диенов.

Вопрос 1.2.

Оптически активные полимеры

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 3.1.

Влияние избытка реагентов и монофункциональных добавок на молекулярную массу полимера.

Вопрос 3.2.

Трехмерная полимеризация и модифицированное уравнение Карозерса, функция ММР для случая нелинейной ступенчатой полимеризации.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 4. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 4.1.

Промышленное получение поливинилового спирта гидролизом поливинилацетата.

Вопрос 4.2.

Целлюлоза и ее производные, получение поливинилбутираля, гидролиз полиметилметакрилата и полиакриламида.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (6 семестр – зачёт с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой – 40 баллов. Билет содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (6 семестр – зачёт с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой – 40 баллов

8.3.2 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (6 семестр – зачёт с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой – 40 баллов. Билет содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос- 20 баллов.

1. Вывод уравнения для скорости радикальной полимеризации.
2. Вывод уравнения для скорости и степени полимеризации фотохимически инициируемой радикальной полимеризации не осложненной процессами передачи цепи.
3. Вывод основного уравнения теории радикальной полимеризации (связь среднечисловой степени полимеризации со скоростью и константами передачи цепи на все компоненты реакционной системы). Вывод уравнения Майо.
4. Вывод уравнений для расчета энергий активации скорости и степени радикальной полимеризации.
5. Вывод уравнения для скорости ингибируемой радикальной полимеризации.
6. Вывод распределения Флори и область его действия.
7. Вывод распределения Шульца и область его действия.
8. Кинетика катионной полимеризации катализируемой кислотами Бренстеда и Льюиса с обрывом цепи.
9. Вывод уравнения для степени катионной полимеризации с учетом процессов передачи цепи.
10. Вывод уравнения для энергии активации скорости катионной полимеризации.
11. Вывод уравнения для скорости и степени анионной полимеризации, инициируемой амидом натрия в среде жидкого аммиака.

12. Вывод необходимого и достаточного объединенного уравнения живой полимеризации.
13. Вывод уравнения для скорости живой анионной полимеризации неполярных мономеров в полярных растворителях (с учетом тесных ионных пар и свободных ионов, как активных центров полимеризации).
14. Вывод уравнения для скорости живой анионной полимеризации неполярных мономеров в неполярных растворителях (с учетом тесных ионных пар и их ассоциатов, как активных центров полимеризации).
15. Вывод для скорости анионной полимеризации полярных мономеров с мономолекулярным обрывом цепи путем циклизации.
16. Вывод уравнения для скорости идеальной живой радикальной полимеризации.
17. Вывод уравнения состава сополимера. Метод Льюиса для определения констант сополимеризации.
18. Вывод уравнения состава сополимера. Метод Файнемана – Росса для определения констант сополимеризации.
19. Уравнение зависимости равновесной концентрации мономера в системе от температуры полимеризации (термодинамика полимеризации).
20. Вывод уравнения Карозерса и его анализ для различных значений средней функциональности.
21. Вывод уравнения для расчета среднечисловой степени полимеризации при поликонденсации при неэквивалентном соотношении реакционноспособных функциональных групп. Влияние добавок монофункциональных соединений.
22. Распределение Флори при поликонденсации. Числовые и массовые функции распределения и выражение для индекса полидисперсности.
23. Вывод уравнений, связывающих максимальную степень полимеризации при поликонденсации с константой поликонденсационного равновесия для случаев удаления и неудаления низкомолекулярного продукта.
24. Вывод уравнений связи среднечисловой степени полимеризации с константой скорости поликонденсации и временем для случая самокатализируемой и катализируемой внешним кислотным катализатором поликонденсации.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачёта (6 семестр).

Зачёт с оценкой по дисциплине «*Основы химии и физики высокомолекулярных соединений*» проводится в 6 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1,2 и 3 рабочей программы дисциплины. Билет для **зачёт с оценкой** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы **зачёта** оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый вопрос – 20 баллов, второй – 20 баллов.

Пример билета для *вид контроля из УП*:

«Утверждаю» Заведующий кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Основы химии и физики высокомолекулярных соединений	
Билет № 1	
1. Вывод основного уравнения теории радикальной полимеризации (связь среднечисловой степени полимеризации со скоростью и константами передачи цепи на все компоненты реакционной системы). Вывод уравнения Майо. 2. Вывод уравнения состава сополимера. Метод Льюиса для определения констант сополимеризации.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Киреев В. В. Высокомолекулярные соединения / - М. : Юрайт, 2013. - 602 с.

Б. Дополнительная литература

1. Оудиан Д. Основы химии полимеров / - М.: Мир, 1974, - 614с

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Высокомолекулярные соединения. Серия А» ISSN 2308-1120
- Журнал «Высокомолекулярные соединения. Серия Б» ISSN 2308-1139
- Журнал «Высокомолекулярные соединения. Серия С» ISSN 2308-1147
- Журнал «Журнал общей химии» ISSN 0044 - 460X
- Журнал «Журнал прикладной химии» ISSN 0044-4618

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <https://elibrary.ru/>
- <https://www.scopus.com/freelookup/form/author.uri?zone=&origin=NO%20ORIGIN%20DEFINED>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 200);
- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 300);

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Основы химии и физики высокомолекулярных соединений»* проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

14. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Цепные процессы синтеза макромолекул	<i>Знает:</i> – Методы синтеза полимеров основными методами полимеризации – Способы очистки полимеров от низкомолекулярных и иных примесей в процессах их получения или модификации – Основные типы полимеров для медико-биологического применения, включая новые типы полимеров со специфическими свойствами <i>Умеет:</i> – Перечислить основные методы синтеза и химические структуры получаемых полимеров <i>Владеет:</i> – Современными представлениями в области химии высокомолекулярных соединений	Оценка за контрольную работу №1 (6 семестр) Оценка за контрольную работу №2 (6 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> с оценкой (6 семестр)
Раздел 2. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – Методы синтеза полимеров основными методами полимеризации – Способы очистки полимеров от	Оценка за контрольную работу №3 (6 семестр) Оценка за

	низкомолекулярных и иных примесей в процессах их получения или модификации – Основные типы полимеров для медико-биологического применения, включая новые типы полимеров со специфическими свойствами <i>Умеет:</i> – Перечислить основные методы синтеза и химические структуры получаемых полимеров <i>Владеет:</i> – Современными представлениями в области химии высокомолекулярных соединений	контрольную работу №4 (6 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> с оценкой (6 семестр)
Раздел 3. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – Особенности химических реакций с участием макромолекул – Способы очистки полимеров от низкомолекулярных и иных примесей в процессах их получения или модификации – Основные типы полимеров для медико-биологического применения, включая новые типы полимеров со специфическими свойствами <i>Умеет:</i> – Перечислить основные методы синтеза и химические структуры получаемых полимеров – Написать основные реакции химической с участием макромолекул и конечные структуры модифицированных полимеров <i>Владеет:</i> – Современными представлениями в области химии высокомолекулярных соединений	Оценка за контрольную работу №5 (6 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> с оценкой (6 семестр)

15. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

« _____ »

основной образовательной программы

« _____ »

код и наименование направления подготовки (специальности)

« _____ »

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе

_____ А. М. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Рентгеноструктурный анализ материалов»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена с.н.с. Сколковского института науки и технологий к.х.н. Савиной А.А.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии»** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Рентгеноструктурный анализ материалов»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участника образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области физической химии, квантовой химии, спектральных методов исследования.

Цель дисциплины – освоение студентами фундаментальных знаний в области рентгеновской и электронной дифракции на поликристаллических материалах и основных практических методов решения научных задач в данной области.

Задачи дисциплины

- формирование у студентов базовых знаний в области рентгеновской и электронной дифракции, понимания специфики дифракции на поликристаллических материалах;
- знакомство студентов с современными методами анализа дифракционных данных;
- обучение студентов работе с современными программными пакетами для порошковой дифракции;
- подготовка студентов к выполнению самостоятельных исследований с использованием дифракционных методов.

Дисциплина **«Рентгеноструктурный анализ материалов»** преподается в 8 семестрах. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;
Безопасность жизнедеятельности	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.1. Знает основные техносферные опасности, их свойства и характеристики УК-8.2. Знает характер воздействия вредных и опасных факторов на человека и природную среду, методы защиты от них применительно к сфере своей профессиональной деятельности УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н) (уровень квалификации – 6) Корректировка и разработка методик комплексного анализа структуры и свойств наноструктурированных композиционных материалов</i>

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- физические основы дифракционных методов исследования материалов; математические основы теории дифракции;
- особенности дифракции на поликристаллических материалах;
- особенности аппаратуры для регистрации дифрактограмм;
- современные методы анализа дифракционных данных, основы структурного анализа;

Уметь:

- правильно спланировать дифракционный эксперимент (пробоподготовка, оптимальная конфигурация прибора, режим съемки);
- выбрать оптимальный метод решения исследовательской задачи, провести первичную обработку дифрактограмм, решать стандартные задачи полнопрофильного анализа.

Владеть:

- современными методами анализа дифракционных данных, включая методы полнопрофильного анализа (метод Ритвельда);
- программными пакетами для обработки дифрактограмм поликристаллических материалов, навыками определения параметров элементарной ячейки;
- уточнения кристаллических структур и определения параметров микроструктуры.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3.6	128	96
Лекции	1.8	64	48
Практические занятия (ПЗ)	1.8	64	48
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1.4	52	39
Контактная самостоятельная работа	1.4	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		52	39
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0.4	0.3
Подготовка к экзамену.		35.6	26.7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1. Основы кристаллохимии	35	10	10	15
1.1	Симметрия кристаллов	7	2	2	3
1.2	Рентгеновское излучение и его взаимодействие с веществом	7	2	2	3
1.3	Основы кинематической теории дифракции	7	2	2	3
1.4	Дифракция на реальных системах. Теоретическая дифрактограмма	7	2	2	3
1.5	Экспериментальная техника дифракционного эксперимента	7	2	2	3
2.	Раздел 2. Первичная обработка дифрактограммы	49	14	14	21
2.1	Профильный анализ. Качественный рентгенофазовый анализ. Базы данных ICDD	7	2	2	3
2.2	Индексирование дифрактограмм. Определение параметров элементарной ячейки.	7	2	2	3
2.3	Симметрия обратного пространства. Взаимосвязь дифрактограммы и кристаллической структуры соединения.	7	2	2	3
2.4	Применение дифракции к исследованию структурных фазовых переходов. Метод гомологии.	7	2	2	3
2.5	Методы решения кристаллической структуры по порошковым дифракционным данным.	7	2	2	3
2.6	Уточнение кристаллических структур. Метод Ритвельда	7	2	2	3
2.7	Количественный рентгенофазовый анализ	7	2	2	3
	Раздел 3. Текстура поликристаллических образцов	24	8	8	8
3.1	Методы анализа текстуры	6	2	2	2
3.2	Дифракция рентгеновского излучения на нанообъектах. Влияние микроструктуры образца на вид дифрактограмм.	6	2	2	2
3.3	Электронная и нейтронная дифракция.	6	2	2	2
3.4	Исследование тонких пленок, рефлектометрия	6	2	2	2
	ИТОГО	108	32	32	44
	Экзамен	36			
	ИТОГО	144			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Основы кристаллохимии.

1.1 Симметрия кристаллов.

Трансляционная симметрия как основной вид симметрии кристаллов. Понятие о кристаллической решетке. Симметрия кристаллической решетки. Решетки Бравэ. Закрытые и открытые элементы симметрии в кристаллах. Математическое описание операций симметрии. Пространственные (Федоровские) группы. Симметрия физических свойств кристалла. Основные данные о кристаллической структуре. Формат CIF, структурные базы данных.

1.2. Рентгеновское излучение и его взаимодействие с веществом

Рентгеновское излучение (РИ) как электромагнитное излучение. Типы источников РИ. Взаимодействие РИ с веществом. Томсоновское рассеяние, комптоновское рассеяние, фотоэффект. Линейный коэффициент поглощения. Зависимость коэффициента поглощения от длины волны – край полосы поглощения. Уравнения Гамильтона-Дарвина. Когерентное упругое рассеяние – дифракция РИ, вывод формулы для определения комплексной амплитуды рассеянного РИ.

1.3. Основы кинематической теории дифракции.

Основные приближения кинематической теории дифракции. Рассеяние на атоме, на цепочке электронов, цепочке атомов. Трансляционная симметрия кристалла, переход к рядам Фурье. Обратная решетка. Закон Брэгга в векторной и скалярной формах. Сфера Эвальда. Атомные факторы рассеяния (форм-факторы). Влияние теплового движения атомов на вид дифрактограммы, параметры атомного смещения (Atomic Displacement Parameters). Заселенность. Структурная амплитуда.

1.4. Дифракция на реальных системах. Теоретическая дифрактограмма.

Параметры, влияющие на интенсивность рефлекса при дифракции на реальных объектах. Поляризационный фактор, влияние монохроматоров. Дифрактограмма поликристаллического образца как 1D проекция 3D дифракционной картины, рассмотрение дифракции на поликристаллической пробе с помощью построения Эвальда. Лоренц-фактор, геометрический фактор. Поглощение РИ в пробе (случай дифракции «на отражение»), абсорбционный фактор. Понятие о текстуре образца, текстурный фактор. Коэффициент экстинкции. Фактор повторяемости рефлексов.

1.5. Экспериментальная техника дифракционного эксперимента

Источники и детекторы РИ. Основные элементы рентгеновской оптики: коллиматоры, монохроматоры, рентгеновские зеркала. Геометрия съемки. Выбор оптимальной геометрии. Планирование эксперимента: выбор излучения, детектора, параметров съемки. Юстировка прибора для решения разных типов задач. Понятие инструментальной функции и спектральной функции. Систематические погрешности в дифракционном эксперименте.

Раздел 2. Первичная обработка дифрактограммы.

2.1. Профильный анализ.

Качественный рентгенофазовый анализ. Базы данных ICDD.

Форматы дифракционных данных, программы конвертации форматов. Описание фона в профильном анализе. «Базовые» аппроксимирующие функции (Гаусса, Лоренца). Реалистичные аппроксимирующие функции (pseudo-Voigt, Pearson VII). Учет асимметрии профиля. Случай немонахроматического излучения (α_1/α_2). Понятие о методе фундаментальных параметров. Угловая зависимость полуширины рефлекса. Критерии качества профильного анализа. Типичный вид разностной дифрактограммы при различных ошибках описания. Основы качественного рентгенофазового анализа:

рентгенограмма как отпечаток пальцев химического соединения. Базы данных ICDD. Структура «карточки» в базе данных PDF-2. «Уровни качества» стандартов. Алгоритмы поиска по базе данных.

2.2. Индексирование дифрактограмм. Определение параметров элементарной ячейки.

Постановка задачи индексирования рентгенограмм. Влияние качества эксперимента. Систематические ошибки определения положения пиков на рентгенограмме. Индексирование рентгенограммы кубической сингонии. Влияние систематических погасаний. Индексирование рентгенограммы средних сингоний (тетрагональной / гексагональной). Три «классические» программы автоиндексирования (Treor, Ito, Dicvol). Критерии корректности индексирования (Де Вольфа, Смита-Снайдера). Сложные случаи для индексирования. Неоднозначность выбора элементарной ячейки (geometrical ambiguities). Проблема «доминантной зоны» (dominant zone). Уточнение параметров элементарной ячейки методом МНК.

2.3. Симметрия обратного пространства. Взаимосвязь дифрактограммы и кристаллической структуры соединения.

Соотношение операций симметрии в прямом и обратном пространствах. Закон Фриделя. Лауэ-класс кристалла. Фактор повторяемости как соотношение порядков точечных групп. Центрировки, матрицы преобразования в прямом и обратном пространствах. Систематические погасания для структур с центрировками. Влияние открытых элементов симметрии на структурную амплитуду. Систематические погасания для открытых элементов симметрии. Правила выбора пространственной группы по данным анализа дифрактограмм.

2.4. Применение дифракции к исследованию структурных фазовых переходов. Метод гомологии.

Понятие о субструктуре и сверхструктуре. Проявление искажения структуры на дифракционной картине. Кратность (multiplicity) отражения. Характер расщепления рефлексов как ключ к определению типа сверхструктуры. Понятие о матрице перехода, примеры применения. Механизмы возникновения сверхструктуры. Общий алгоритм действий при индексировании методом гомологии. Преобразование различных векторов при переходе к сверхструктуре. Понятие о «нестандартных установках» пространственных групп. Алгоритмы и программы поиска сверхструктуры. Систематический подход к структурным фазовым переходам (понятие о теоретико-групповых методах, ТГ). Глэзеровская классификация искаженных перовскитов и ее развитие с использованием ТГ-методов.

2.5. Методы решения кристаллической структуры по порошковым дифракционным данным.

Отличие порошкового и монокристалльного экспериментов, перекрывание пиков. Этапы решения структуры по порошковым данным. Экспериментальные подходы к проблеме наложения пиков. Два подхода к решению структуры по порошковым данным. Методы определения «массива $|F|$ »: методы Паули и Ле Бейля. Стандартные «монокристалльные» методы решения структуры: функция Паттерсона, прямые статистические методы. Методы оптимизации «в реальном пространстве»: общая схема; алгоритм «имитации отжига» (simulated annealing). Метод «инверсии заряда» (charge flipping), особенности. Разностный Фурье-синтез.

2.6.. Уточнение кристаллических структур. Метод Ритвельда

Математические основы метода Ритвельда. Уточняемые параметры в методе Ритвельда. Профильная функция: практические советы по схеме уточнения профильных

коэффициентов. Рекомендованная последовательность уточнения параметров. Факторы недостоверности, ограничения. «Проблема отрицательных тепловых». Корреляция между параметрами: примеры, матрица корреляции. Стандартные отклонения уточняемых параметров. Программы для уточнения структуры методом Ритвельда (GSAS, Fullprof, Rietan, Topas, Jana, Siroquant), их особенности.

2.7. Количественный рентгенофазовый анализ.

Распространение РИ в поликристаллическом образце. Средний коэффициент поглощения. Микроабсорбция. Взаимосвязь между объемной долей фазы и интенсивностью рефлекса. Основные «стандартные» методы количественного фазового анализа: метод прямой калибровки, метод добавок, метод внутреннего стандарта. Метод корундовых чисел (внешнего стандарта). Метод Ритвельда как бесстандартный количественный рентгенофазовый анализ. Определение абсолютных содержаний кристаллических фаз: методы $k\alpha$ и PONCKS.

Раздел 3. Текстура поликристаллических образцов.

3.1. Методы анализа текстуры.

Текстура как преимущественная ориентация кристаллитов в образце. Феноменологическое описание текстуры, эллиптическая текстура. Модель Марча-Долласа. Правила выбора оси текстурирования. Фундаментальное рассмотрение проблемы, понятие о функции распределения ориентировок (Orientation Distribution Function, ODF). Полюсные фигуры, методы расчета ODF.

3.2. Дифракция рентгеновского излучения на нанообъектах. Влияние микроструктуры образца на вид дифрактограмм.

Три вклада в уширение дифракционных пиков. Инструментальное уширение, коррекция. Дифракция на конечном кристалле. Уширение, обусловленное малым размером областей когерентного рассеяния (ОКР). Формула Шеррера, её ограничения. Уширение, обусловленное микродеформациями. Разделение вкладов, метод Вильямсона-Холла. Реализация в методе Ритвельда, интерпретация профильных коэффициентов. Понятие о методах гармонического анализа (Уоррена-Авербаха). Влияние полидисперсности, подходы к определению распределения по размерам ОКР. Понятие о методе WPPM (Whole Powder Pattern Modeling).

3.3. Электронная и нейтронная дифракция.

Особенности трех дифракционных методов. Специфика электронной дифракции, многократное рассеяние. Дифракция в сходящемся пучке (CBED). Дифракция на прецессирующем пучке. Электронная микроскопия высокого разрешения. CC, CS – коррекция. Две реализации нейтронографического эксперимента: с постоянной длиной волны и времяпролетный (TOF) метод, их сравнение и области применения. Особенности рассеяния нейтронов. Магнитное рассеяние нейтронов. Случаи ферромагнитного и антиферромагнитного упорядочения. Черно-белая (Шубниковская) симметрия. Систематический (теоретико-групповой) подход к определению магнитной структуры (введение). Определение локальной структуры: метод PDF.

3.4. Исследование тонких пленок, рефлектометрия.

Геометрия скользящего пучка (grazing angle geometry). Проблема дефокуса, инструментальное оформление метода. Влияние толщины/плотности пленки на вид дифрактограммы при симметричной дифракции. Текстурирование пленок. Преломление РИ, коэффициент преломления РИ. Явление полного внешнего отражения, понятие о рентгеновской рефлектометрии. Отражение от подложки, системы пленка-подложка,

гетероструктуры. Осцилляции Киссига. Рефлектограмма и ее связь с Фурье-образом распределения электронной плотности в образце.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	– физические основы дифракционных методов исследования материалов; математические основы теории дифракции;	+		
2	– особенности дифракции на поликристаллических материалах;		+	
	– особенности аппаратуры для регистрации дифрактограмм;		+	+
	– современные методы анализа дифракционных данных, основы структурного анализа;			+
	Уметь:			
3	– правильно спланировать дифракционный эксперимент (пробоподготовка, оптимальная конфигурация прибора, режим съемки);	+		
4	– выбрать оптимальный метод решения исследовательской задачи, провести первичную обработку дифрактограмм, решать стандартные задачи полнопрофильного анализа.		+	+
	Владеть:			
5	– современными методами анализа дифракционных данных, включая методы полнопрофильного анализа (метод Ритвельда);		+	
6	– программными пакетами для обработки дифрактограмм поликристаллических материалов, навыками определения параметров элементарной ячейки;			+
7	– уточнения кристаллических структур и определения параметров микроструктуры		+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>универсальные и профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>				
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения		
8	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;	+	+

9	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.1. Знает основные техносферные опасности, их свойства и характеристики УК-8.2. Знает характер воздействия вредных и опасных факторов на человека и природную среду, методы защиты от них применительно к сфере своей профессиональной деятельности УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций	+	+	+
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения			
10	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Практическое занятие 1 «Симметрия кристаллов и основные данные о кристаллической структуре»	2
2	1	Практическое занятие 2 «Рентгеновское излучение и его взаимодействие с веществом»	2
3	1	Практическое занятие 3 «Дифракция на реальных системах»	2
4	1	Практическое занятие 4 «Экспериментальная техника дифракционного эксперимента»	4
5	2	Практическое занятие 5 «Индексирование дифрактограмм. Определение параметров элементарной ячейки неорганических соединений. Знакомство с базой ICDD»	4
6	2	Практическое занятие 6 «Применение дифракции к исследованию структурных фазовых переходов. Метод гомологии»	2
7	2	Практическое занятие 7 «Уточнение кристаллической структуры методом Ритвельда с использованием пакета программ Jana2006»	6
8	2	Практическое занятие 8 «Количественный фазовый анализ»	2
9	3	Практическое занятие 9 «Методы анализа текстуры»	2
10	3	Практическое занятие 10 «Дифракция рентгеновского излучения на нанобъектах»	2
11	32	Практическое занятие 11 «Индексирование электронной дифракции. Уточнение кристаллической структуры по данным нейтронной дифракции»	4

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторные занятия по дисциплине не предусмотрены.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;

- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **экзамена** (5 семестр) и лабораторного практикума.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 5 контрольных работ. Максимальная оценка за контрольные работы 1,2 и 5 составляет 15 баллов за каждую. Максимальная оценка за контрольную работу 3 составляет 7 баллов, за контрольную работу 4- 8 баллов.

Раздел 1. Основы кристаллохимии.

Контрольная работа №1 содержит 5 вопроса, по 3 балла за вопрос.

1. Что такое "идеальный кристалл"? Чем реальная структура кристалла отличается от идеальной?
2. Чем различаются понятия "кристаллическая структура" и "кристаллическая решетка"? Поясните на примере.
3. Нарисуйте следующие векторы направления в кубической элементарной ячейке: $[110]$, $[112]$ и $[-32-1]$. Затем повторите для ромбической решетки с параметрами решетки (2, 3, 4, 90, 90, 90).
4. Приведите координаты всех атомов для кубической элементарной ячейки ГЦК.
5. Какие операции симметрии называются закрытыми?

Контрольная работа №2 содержит 5 вопросов, по 3 балла за вопрос.

1. Какое физическое явление лежит в основе рентгеноструктурного анализа? На чем рассеиваются рентгеновские лучи?
2. Назовите основные положения кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей.
3. Теоретическая дифрактограмма. Фактор повторяемости. LPG-фактор.
4. Назовите основные геометрии съемки в порошковой дифракции, источники рентгеновского излучения, основные типы точечных и координатных детекторов рентгеновского излучения.
5. Какие формулы выражают зависимость интенсивности дифракционного луча от кристаллической структуры?

Раздел 2. Первичная обработка дифрактограммы.

Контрольная работа №3 содержит 2 вопроса, 3 балла за теоретический вопрос и 4 балла за практическое задание.

1. Для какой цели используется рентгенофазовый анализ? В чем сущность этого метода?
2. Описать профиль экспериментальной рентгенограммы с учётом дублетности $\text{CuK}\alpha$ -излучения, определить положения пиков на рентгенограмме, их интегральных интенсивностей и полуширин. Провести рентгенофазовый анализ с помощью базы данных ICDD PDF-2, проиндицировать все пики на исследованной рентгенограмме. Уточнить параметры элементарной ячейки.

Контрольная работа №4 содержит 2 вопроса, 4 балла за теоретический вопрос и 4 балла за практическое задание.

1. Математические основы метода Ритвельда. Уточняемые параметры в методе Ритвельда.
2. Уточнить профильные параметры для образца. Уточнить заселенности позиций в твёрдом растворе и провести количественный рентгенофазовый анализ смеси фаз. Подготовить CIF файл.

Раздел 3. Текстура поликристаллических образцов.

Контрольная работа №5 содержит 5 вопросов, по 3 балла за вопрос.

1. Назовите основные методы описания текстуры образцов, причины текстурирования.
2. Какое физическое явление лежит в основе нейтронографии и электронографии? На чем рассеиваются нейтроны и электроны?
3. Какие дифракционные методы (кроме рентгенографии) используются для определения структуры кристаллов? В чем их преимущества и недостатки?
4. Влияние микроструктуры образца на вид дифрактограммы. Приведите примеры.
5. Особенности дифракции на тонких пленках. Рентгеновская рефлектометрия.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (8 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1,2 и 3 рабочей программы дисциплины и содержит 3 теоретических вопроса и 1 практическое задание. 1 вопрос – 8 баллов, вопрос 2 – 8 баллов, вопрос 3 – 8 баллов, практическое задание – 16 баллов.

1. Рентгеновское излучение и его взаимодействие с веществом. Томсоновское и комптоновское рассеяние, фотоэффект.
2. Взаимосвязь симметрии в прямом и обратном пространстве. Закон Фриделя. Лауэ-класс кристалла. Понятие о систематических погасаниях.
3. Влияние микроструктуры образца на вид дифрактограммы. Малость ОКР. Микродеформации. Методы определения размеров ОКР и величины микродеформаций.
4. Кристалл как высокосимметричная система. Операции симметрии для кристаллов, сингонии, пространственные группы.
5. Профильный анализ как вариационная задача. Основные виды профильных функций. Зависимость Кальотти. Методы описания фона. Нелинейный МНК.

6. Понятие об электронной дифракции и электронной микроскопии высокого разрешения.
7. Понятие дифракции рентгеновского излучения. Взаимосвязь амплитуды рассеянного излучения с электронной плотностью системы-рассеивателя.
8. Качественный рентгенофазовый анализ. Основные принципы, базы данных ICDD. Индицирование порошковых дифрактограмм. Автоматическое и ручное индицирование, уточнение параметров элементарной ячейки.
9. Дифракция на тонких пленках. Рентгеновская рефлектометрия.
10. Закон Брегга-Вульфа в векторной и скалярной формах. Трансляционная симметрия и ее влияние на характер дифракции РИ. Сфера Эвальда
11. Дифракция нейтронов. Определение магнитной структуры вещества.
12. Профильный анализ как вариационная задача. Основные виды профильных функций. Зависимость Кальотти. Методы описания фона. Нелинейный МНК
13. Понятие дифракции рентгеновского излучения. Взаимосвязь амплитуды рассеянного излучения с электронной плотностью системы-рассеивателя.
14. Текстура. Методы описания текстуры образцов, причины текстурирования.
15. Понятие об электронной дифракции и электронной микроскопии высокого разрешения.

Примеры практических заданий к экзаменационному билету:

1. Проведение рентгенофазового анализа смеси, состоящей из трех и более компонентов. Определение параметров элементарной ячейки и состава каждого компонента. Составление отчета.
2. Уточнение кристаллической структуры по данным рентгеновской дифракции. Составление отчета в виде CIF файла, письменного отчета, включающие иллюстрации рентгенограмм, таблиц и кристаллических структур.
3. Количественный фазовый анализ методом Ритвельда. Составление отчета.
4. Определение кристаллической структуры по данным нейтронной и рентгеновской дифракции. Составление отчета.
5. Индицирование данных электронной дифракции. Составление отчета.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (8 семестр).

Экзамен по дисциплине «*Рентгеноструктурный анализ материалов*» проводится в 8 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1,2 и 3 рабочей программы дисциплины. Билет для *экзамена* состоит из 3 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__г	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Солтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
	Рентгеноструктурный анализ материалов
Билет № 1	
1. Вопрос Понятие дифракции рентгеновского излучения. Взаимосвязь амплитуды рассеянного излучения с электронной плотностью системы-рассеивателя. 2. Вопрос Текстура. Методы описания текстуры образцов, причины текстурирования. 3. Вопрос Понятие об электронной дифракции и электронной микроскопии высокого разрешения.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. V.K. Pecharsky, P.Y. Zavalij "Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials": Springer (2009)
2. А. Вест «Химия твёрдого тела»: М., Мир (1988) – т.1.
3. Л.М. Ковба, В.К. Трунов «Рентгенофазовый анализ»: М., изд. МГУ (1976)
4. Третьяков Ю.Д. Введение в химию твердофазных материалов. М., изд-во МГУ, 2006.
5. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высш. школа, 1989.

Б. Дополнительная литература

1. "The Rietveld method" (Edited by R.A.Young): International Union of Crystallography book series, Oxford University Press (1993)
2. "Structure Determination from Powder Diffraction Data" (Edited by W.I.F. David *et al.*): Oxford University Press (2002)
3. Г.С. Жданов, А.С. Илюшин, С.В. Никитина, «Дифракционный и резонансный структурный анализ»: М., Наука (1980)
4. Дж. Каули, «Физика дифракции»: М., Мир (1979)
5. T. Egami, S.J.L. Billinge, "Underneath the Bragg Peaks: Structural Analysis of Complex Materials": Pergamon Materials Series – vol. 7 (2003)
6. Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции. М.: Химия, 1978.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

1. L.B. McCusker, R.B. Von Dreele, D.E. Cox, D. Louer, P. Scardi, "Rietveld refinement guidelines", *Journal of Applied Crystallography*, **32**, 36-50 (1999)

2. D. Balzar, N. Audebrand, M.R. Daymond, A. Fitch, A. Hewat, J.I. Langford, A. Le Bail, D. Louer, O. Masson, C.N. McCowan, N. C. Popa, P.W. Stephens and B. H. Toby, "Size-strain line-broadening analysis of the ceria round-robin sample", *Journal of Applied Crystallography*, **37**, 911-924 (2004)
3. Brian H. Toby, "R factors in Rietveld analysis: How good is good enough?", *Powder Diffraction*, **21**, 67-70 (2006)
4. Radovan Cerny, Vincent Favre-Nicolin, "Direct space methods of structure determination from powder diffraction: principles, guidelines and perspectives", *Zeitschrift für Kristallographie*, **222**, 105–113 (2007).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Рентгеноструктурный анализ материалов» проводятся в форме лекционных, семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Основы кристаллохимии	<i>Знает:</i> – физические основы дифракционных методов исследования материалов; математические основы теории дифракции; <i>Умеет:</i> – правильно спланировать дифракционный эксперимент (пробоподготовка, оптимальная конфигурация прибора, режим съемки);	Оценка за контрольную работу №1,2 (8 семестр) Оценка за экзамен (8 семестр)
Раздел 2. Первичная обработка дифрактограммы	<i>Знает:</i> – особенности дифракции на поликристаллических материалах; – особенности аппаратуры для регистрации дифрактограмм; <i>Умеет:</i> – выбрать оптимальный метод решения исследовательской задачи, провести первичную обработку дифрактограмм, решать стандартные задачи полнопрофильного анализа. <i>Владеет:</i> – современными методами анализа дифракционных данных, включая методы полнопрофильного анализа (метод Ритвельда); – уточнения кристаллических структур и определения параметров микроструктуры.	Оценка за контрольную работу №3,4 (8 семестр) Оценка за экзамен (8 семестр)
Раздел 3. Текстура поликристаллических образцов	<i>Знает:</i> – особенности аппаратуры для регистрации дифрактограмм; – современные методы анализа дифракционных данных, основы структурного анализа; <i>Умеет:</i> – выбрать оптимальный метод решения исследовательской задачи, провести первичную обработку дифрактограмм, решать стандартные задачи полнопрофильного анализа. <i>Владеет:</i> – программными пакетами для обработки дифрактограмм	Оценка за контрольную работу №5 (8 семестр) Оценка за экзамен (8 семестр)

	поликристаллических материалов, навыками определения параметров элементарной ячейки; – уточнения кристаллических структур и определения параметров микроструктуры.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

« _____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Современные композиционные материалы»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии »**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

« _____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена профессором кафедры химической технологии пластических масс РХТУ имени Д.И. Менделеева д.х.н., доц. В.А. Дятловым
и заведующим кафедрой Сколтеха профессором В.Ф. Травенем

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направления подготовки **04.03.01 Химия**, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой Сколтеха **«Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии»** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Современные композиционные материалы»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку по дисциплинам: органический синтез, материаловедение, спектральные методы исследования в химии и материаловедении.

Цель дисциплины – повышение общенаучной и методологической компетенции в области технологии композиционных и нетканых материалов получаемых на основе полимеров. Указанные компетенции необходимы для решения профессиональных задач в области химии и технологии полимеров.

Задачи дисциплины–

- формирование общих представлений о современных технологиях получения нетканых и композиционных материалов;
- закрепление ранее полученных знаний о физических принципах, лежащих в основе основных методов получения наполненных полимерных материалов;
- формирование знаний основ материаловедения применительно к полимерным композиционным материалам;
- ознакомление со способами исследования основных свойств полимеров материалов с использованием подходов и методов, принятых в материаловедении для исследования поверхности и объема материала

Дисциплина **«Современные композиционные материалы»** преподается в 6 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины «направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Системное и критическое мышление	УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи. УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи. УК-1.5 Определяет и оценивает практические последствия возможных вариантов решения задачи
Разработка и реализация проектов	УК-2. Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений	УК-2.1 Определяет круг задач в рамках поставленной цели, определяет связи между ними. УК-2.2 Предлагает способы решения поставленных задач и ожидаемые результаты; оценивает предложенные способы с точки зрения соответствия цели проекта УК-2.3 Планирует реализацию задач в зоне своей ответственности с учетом имеющихся ресурсов и ограничений, действующих правовых норм УК-2.4 Выполняет задачи в зоне своей ответственности в соответствии с запланированными результатами и точками контроля, при необходимости корректирует способы решения задач УК-2.5 Представляет результаты проекта, предлагает возможности их использования и/или совершенствования

Профессиональных компетенций и индикаторов их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-7. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических и гибридных соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-7.1. Знает современные методы, использующиеся при проектировании направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи ПК-7.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения направленного синтеза органических и гибридных соединений по заданию специалиста более высокой квалификации ПК-7.3 Владеет приёмами обработки, анализа, интерпретации результатов эксперимента по проведению направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономичных и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные области применения нетканых материалов различных типов;
- виды полимерных композиционных материалов (ПКМ), способы наполнения, принципы создания и расчета основных свойств;
- существующие физико-химические и спектральные методы исследования структуры и свойств полимерных композиционных материалов (ПКМ) и их специфику;
- технологии и оборудование, используемое при производстве полимерных нетканых материалов (ПНМ);
- физические и принципы, лежащие в основе каждого метода получения НМ и ПКМ;
- основные типы используемого технологического оборудования и принцип их работы;

Уметь:

- разрабатывать возможность комплексного подхода для анализа свойств ПКМ двумя и более различными методами;
- правильно выбрать марку исходного полимера и вспомогательных компонентов для производства требуемого нетканого материала;
- контролировать основные параметры технологического режима производства ПНМ;
- определять возможную причину технологического брака и уметь ее устранить;
- выбрать связующие и тип наполнителя для создания ПКМ и ПНМ с требуемыми потребительскими свойствами;
- выбирать последовательность методов для исчерпывающего анализа химических, физико-химических и механических свойств ПКМ;

Владеть:

- методами расчета основных свойств композиционных материалов в зависимости от свойств наполнителя и связующих
- прогностическими и аналитическими методами определения основных физическо-механических свойств композиционных и нетканых материалов
- способностью оценивать достоверность и точность анализа и его результатов;
- навыками работы на рутинных приборах общего пользования.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1.8	64	48.6
Лекции	0.9	32	24.3
Практические занятия (ПЗ)	0.9	32	24.3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1.2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1.2	0,4	0,4 32,6
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43.6	
Вид итогового контроля:		зачёт с оценкой	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лек-ции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1. Технология полимерных композиционных материалов (ПКМ).	41	15	15	18
1.1	Введение. Основные понятия и термины.. Классификация ПКМ их назначение и требования предъявляемые к ним. Факторы, влияющие на свойства ПКМ .	9	5	5	3
1.2	Физико-химические принципы создания ПК. Влияние фазовой структуры на свойства ПКМ.	13	4	4	5
1.3	Наполнители используемые при создании ПКМ.	12	3	3	7
1.4	Газонаполненные ПКМ, их способы получения, типы и основные свойства. Газообразователи- порофоры.	7	3	3	3
2.	Раздел 2. Нетканые материалы(НМ)	43	15	15	18
2.1	Введение. Основные свойства и области применения полимерных нетканых материалов. Свойства основных крупнотоннажных полимеров используемых для получения НМ. Стадии получения полимерных НМ	14	4	4	8
2.2	Фильерные способы получения НМ технологии и оборудование. Фильерно-раздувные способы. Композитные многослойные материалы СМС и СММС.	10	4	4	3

2.3	Гидроструйный способ получения НМ, технология и используемое оборудование. Электропрядение – способ получения НМ с волокнами несущими статический заряд. Сухие и плюсухие способы прядения наполненных волокон для адсорбционноактивных НМ.	11	4	4	4
2.4	Основные области применения НМ. Нетканые материалы в средствах гигиены. Биоразлагаемые нетканые материалы – способы получения.	8	3	3	3
3.	Раздел 3. Конструкционные газонаполненные ПКМ для аэрокосмической промышленности	23	4	6	8
3.1	Авиационные пены Рохасел, способы синтеза и основные свойства	9	3	3	3
3.2	Поликарилимидные пены – блочный и растворный способы синтеза исходного сополимера.	8	1	3	3
3.3	Полиакрилимидные пены, синхронизация процессов вспенивания и имидизации.	6	1		2
	ИТОГО	108	32	32	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Технология полимерных композиционных материалов (ПКМ).

1.1. Введение. Основные понятия и термины. Три основных типа КМ. Классификация ПКМ, их отличительные особенности, цели создания, назначение и требования предъявляемые к ним. Факторы, влияющие на свойства, «Принципиальные» недостатки ПКМ. «Принципиальные» факторы, приводящие к улучшению свойств ПКМ.

1.2. Физико-химические принципы создания ПК. Влияние фазовой структуры на свойства ПКМ. Параметры, определяющие структуру ПКМ. Влияние твердого наполнителя. Влияние его содержания, размера и формы частиц. Межфазные взаимодействия, композиты с армирующим наполнителем.

1.3. Наполнители, используемые при создании ПКМ. Основные виды наполнителей и наполненных полимерных материалов. Волокниты, текстолиты, гетинаксы и их характеристики. Основные дисперсионные и волокнистые наполнители и их характеристики.

1.4 Газонаполненные ПКМ, их способы получения, типы и основные свойства. Основные типы структур газонаполненных ПКМ, способы формования газосодержащей структуры, стадии их формирования. Пено и поропласты, синтактные пены. Виды вспенивания. Физико-химические закономерности вспенивания пластмасс. Вспенивающие вещества, химические газообразователи, физические газообразователи- порофоры.

Раздел 2. Нетканые материалы (НМ)

2.1. Введение. Основные свойства и области применения полимерных нетканых материалов. Свойства основных крупнотоннажных полимеров используемых для получения НМ. Особенности НМ из хлопка, производных целлюлозы, вискозы, древесного волокна. НМ из синтетических полимеров: полиэтилена, полипропилена, полиэфиров, полиакрилонитрила, полиуретана, ПВХ. полиакриламида. Основные стадии

и варианты процесса производства полимерных НМ. Аэродинамическое скрепление волокон в холсте, термоскрепление, химическое скрепление, иглопробивной способ, прошивной способ, струйное скрепление.

2.2. Фильтрные способы получения НМ технологии и оборудование. Преимущества фильтрных способов, используемы волокнообразующие полимеры. Холодное формование «Спанбонд». Фильтрно-раздувные способы «Мельтблаун». Композитные многослойные материалы СМС и СММС.

2.3. Гидроструйный способ получения НМ, технология и используемое оборудование. Технологическая схема, машинное оформление. Гидроструйное устройство, интенсивность сплетения и мощность струи. Способы получения трехмерного рисунка при помощи рельефной конвейерной решетки или на системе барабанов. Получение перфорированного НМ. Композитные многослойные НМ получаемые гидроструйным сплетением. Преимущества гидроструйного способа сплетения.

Электропрядение – способ получения НМ с волокнами несущими статический заряд. Сухие и плюсухие способы прядения наполненных волокон для адсорбционноактивных НМ.

2.4 Основные области применения НМ. Рынок нетканых материалов, объемы производства, тенденции рынка НМ, основные производители. Нетканые материалы в средствах гигиены. Потребительские свойства и достоинства нетканых материалов «Спанбонд» и «Мелтблаун». Применение НМ в прокладках и подгузниках. Дополнительная химическая обработка НМ. Материалы для мебельного производства, для фильтрации газов и жидкостей, укрывные материалы, НМ в строительстве. Биоразлагаемые нетканые материалы – способы получения.

Раздел 3. Конструкционные газонаполненные ПКМ для аэрокосмической промышленности

3.1. Конструкционные пены для высокотехнологичных областей техники. Пеноматериалы из реактопластов. Звукоизолирующие меламиновые пены. Теплостойкие газонаполненные ПКМ из ароматических полиимидов, технология синтеза полимера предшественника, способы имидизации при вспенивании, применение в военном самолетостроении. Авиационные пены Рохасел, способы синтеза и основные свойства. Линейка гражданских конструкционных пен Рохасел различной плотности, негорючие пены, рим процесс, вспенивание в ограниченном объеме. Применение в аэрокосмической, судостроительной и автомобильной промышленности, медицине и спортивном инвентаре.

3.2. Полиакрилимидные пены – блочный и растворный способы синтеза исходного сополимера. Проблема теплоотвода. Варианты аппаратного оформления блочной полимеризации. Технология радикальной сополимеризации акриламида с метакриловой кислотой в крупных блоках в присутствии смеси ингибитора с инициатором (процесс Рафикова). Растворная, эмульсионная и суспензионная сополимеризация, проблема микроблочности, зависимость состава от конверсии. Способы анализа имидизуемости по определению количества имидизуемых последовательностей в цепи сополимера. Имидизуемые сополимеры, получаемые методом полимераналогичных превращений.

3.3. Полиакрилимидные пены, синхронизация процессов вспенивания имидизации и ангидридации сополимера. Влияние термомеханических характеристик на процесс пенообразования. Типы химических и физических порофоров, используемых в конструкционных пенах. Зависимость температуры имидизации от типа имидизующихся функциональных групп сополимера. Тройные сополимеры. Содержащие кислотные, нитрильные и амидные группы в основной цепи сополимера. Физико-механические характеристики полиакрилимидных пеноматериалов.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	– виды полимерных композиционных материалов (ПКМ), способы наполнения, принципы создания и расчета основных свойств; – существующие физико-химические и спектральные методы исследования структуры и свойств полимерных композиционных материалов (ПКМ) и их специфику;	+		+
2	технологии и оборудование, используемое при производстве полимерных нетканых материалов (ПНМ); основные области применения нетканых материалов различных типов;		+	
3	физические принципы, лежащие в основе каждого метода получения НМ и ПКМ, основные типы технологического оборудования и принцип их работы;	+	+	+
	Уметь:			
3	обоснованно выбирать связующие марку полимера и тип наполнителя для создания ПКМ или ПНМ с требуемыми потребительскими свойствами;	+	+	+
4	разрабатывать возможность комплексного подхода для анализа свойств ПКМ двумя и более различными методами; выбирать последовательность методов для исчерпывающего анализа химических, физико-химических и механических свойств ПКМ;	+		+
	выбрать марку исходного полимера и вспомогательных компонентов для производства требуемого нетканого материала; контролировать основные параметры технологического режима производства ПНМ;		+	
	определять возможную причину технологического брака и уметь ее устранить;	+	+	+
	Владеть:			
5	методами расчета основных свойств композиционных материалов в зависимости от свойств наполнителя и связующих способностью оценивать достоверность и точность анализа и его результатов;	+		+
6	прогностическими и аналитическими методами определения основных физическо-механических свойств композиционных и нетканых материалов;	+	+	+

	навыками работы на рутинных приборах общего пользования. методами расчета результатов анализа полимера тем или иным способом;		+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>универсальные и профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>					
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК			
7	УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход.	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи. УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи. УК-1.5 Определяет и оценивает практические последствия возможных вариантов решения задачи	+	+	+

8	УК-2. Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений	УК-2.1 Определяет круг задач в рамках поставленной цели, определяет связи между ними. УК-2.2 Предлагает способы решения поставленных задач и ожидаемые результаты; оценивает предложенные способы с точки зрения соответствия цели проекта УК-2.3 Планирует реализацию задач в зоне своей ответственности с учетом имеющихся ресурсов и ограничений, действующих правовых норм УК-2.4 Выполняет задачи в зоне своей ответственности в соответствии с запланированными результатами и точками контроля, при необходимости корректирует способы решения задач УК-2.5 Представляет результаты проекта, предлагает возможности их использования и/или совершенствования	+	+	+
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			

9	ПК-7. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических и гибридных соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-7.1. Знает современные методы, используемые при проектировании направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи ПК-7.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения направленного синтеза органических и гибридных соединений по заданию специалиста более высокой квалификации ПК-7.3 Владеет приёмами обработки, анализа, интерпретации результатов эксперимента по проведению направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданными свойствами	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы (ак.)
1	1.1	«Принципиально» улучшающие и «Принципиально» ухудшающие факторы, влияющие на свойства ПКМ. Физико-химические, физико-механические и оптические способы изучения ПКМ. Фрактальность при изучении ПКМ, методами, принятыми в материаловедении.	2
2	1.2	Композиты с армирующим наполнителем. Углерод-углеродные, стеклоуглеродные и базальт – углеродные ПКМ, получаемые способом намотки на форму.	2
3	1.3	Наполнители для эпоксид-содержащих ПКМ. Волоконные наполнители, стеклоткань, углеткань, препреги и способы их пропитки- промазки связующим. РИМ – процесс, вакуум формование изделий из препрегов.	2
4	1.4	Пенопласты и поропласты, их отличия, способы получения и области применения. Синтактные пены – технологии получения и области применения.	2
5	2.1	Требования к полимерам, используемым при получении НМ. Марочный состав полимеров и способы контроля основных свойств сырья в зависимости от технологии получения НМ. Ключевые параметры для контроля.	4
6	2.2	Способы скрепления волокон в НМ, получаемых фильерными методами. Контроль прочности, удельной плотности и толщины материалов типа СМС и СММС.	4
7	2.3	Принципиальная схема процесса электропрядения. Свойства нетканых материалов, получаемых этим способом. Фильтры Петрянова – уникальность свойств и основные области применения.	4
8	2.4	Принципиальная технологическая схема получения биоразлагаемых нетканых материалов, области их применения и основные недостатки.	4
9	3.1	Способы вспенивания и имидизации полиакрилимидных конструкционных пен. Одно и двухстадийное вспенивание. Вспенивание в экструдере и в прессе. Свободное вспенивание и ограниченное вспенивание. Способы контроля типа пор (открытые-закрытые) и плотности пеноматериала. Методы измерения прочности газонаполненных ПКМ.	4
10	3.2	Определение состава имидизующихся	4

		сополимеров до и после отверждения. Прогностический расчет предельной степени имидизации по комбинации данных ИК и ЯМР ¹³ C спектроскопии исходных сополимеров до вспенивания.	

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- подготовка к контрольным работам;
- анализ и усвоение лекционного материала;
- работа с учебной и научной литературой;
- подготовку к сдаче *зачёта с оценкой* (6 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 30 баллов), написания реферата (максимальная оценка 30 баллов) и итогового контроля в форме *Зачёта с оценкой* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

1. Классификация ПКМ их назначение и требования предъявляемые к ним
2. Физико-химические принципы создания ПК. Влияние фазовой структуры на свойства ПКМ
3. Наполнители используемые при создании ПКМ.
4. Газонаполненные ПКМ, их способы получения, типы и основные свойства.
5. Основные свойства и области применения полимерных нетканых материалов
6. Фильтрующие способы получения НМ технологии и оборудование
7. Композитные многослойные материалы СМС и СММС.
8. Гидроструйный способ получения НМ, технология и используемое оборудование.
9. Электропрядение – способ получения НМ с волокнами несущими статический заряд
10. Биоразлагаемые нетканые материалы – способы получения

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы составляет по 10 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Межфазные взаимодействия в ПКМ.
2. Композиты с армирующими наполнителями

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Применение нетканых материалов в медицине, сельском хозяйстве , производстве мебели и устройствах фильтрации жидкостей и газов .
2. Технологическая схема гидроструйного способа скрепления нетканых материалов и ее разновидности.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Процессы происходящие при вспенивании.
2. Физико-химические закономерности вспенивания пластмасс, образование пузырьков и расчет их размера.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (6 семестр – зачёт с оценкой.).

Билет содержит 3 вопроса. 1 вопрос – 15 баллов, вопрос 2 – 15 баллов, вопрос 3 – 10 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (6 семестр- зачёт с оценкой).

1. Основные типы конструкционных материалов, их назначение и основные свойства.
2. Цели создания ПКМ и их отличительные особенности.
3. Классификация ПКМ.
4. «Принципиальные» недостатки ПКМ
5. «Принципиальные факторы» приводящие к улучшению свойств ПКМ
6. Параметры, определяющие структуру ПКМ, влияние фазовой структуры на свойства.
7. Влияние содержания наполнителя на прочность и вязкость.
8. Влияние формы и размера недеформируемого наполнителя на прочность ПКМ.
9. Межфазные взаимодействия в ПКМ.
10. Композиты с армирующими наполнителями
11. Основные типы структур при разделении фаз.
12. Виды наполнителей и их характеристики
13. Дисперсные наполнители, удельная поверхность, истинная и насыпная плотность, объемная и весовая доля наполнителя.
14. Полые дисперсные наполнители.
15. Волокнистые наполнители
16. Применение нетканых материалов в средствах личной гигиены.
17. Применение нетканых материалов в медицине, сельском хозяйстве , производстве мебели и устройствах фильтрации жидкостей и газов.
18. Технологическая схема гидроструйного способа скрепления нетканых материалов и ее разновидности.

19. Основные расчетные параметры гидроскрепления.
20. Получение рельефного нетканого материала гидроструйным способом. Разновидности технологических схем.
21. Общая технологическая схема получения нетканых материалов фильтренным способом. Виды сырья и требования к исходным полимерам.
22. Холодный фильтренный способ. Общая технологическая схема, основные операции. Основные преимущества материала, получаемого этим способом.
23. Фильтренно-раздувной способ. Общая технологическая схема, основные операции. Основные преимущества материала, получаемого этим способом.
24. Композиционные многослойные нетканые материалы, получаемые фильтренным способом. Типы композиционных материалов. Общая технологическая схема, основные операции. Основные преимущества материалов, получаемых этим способом.
25. Общие определения нетканых материалов, история способа, основные технологии, объемы производства, основные области применения.
26. Основные полимеры, используемые для производства нетканых материалов, их свойства.
27. Основные стадии технологического процесса производства нетканых материалов. Варианты процесса производства.
28. Варианты процесса формирования холста.
29. Варианты процесса скрепления волокон в холсте
30. Газоструктурный элемент, основные типы структур.
31. Получение газонаполненных ПКМ, состав пенообразующих композиций.
32. Процессы происходящие при вспенивании.
33. Физико-химические закономерности вспенивания пластмасс, образование пузырьков и расчет их размера.
34. Вспенивающие вещества, физические газообразователи.
35. Химические газообразователи.
36. Вещества, выделяющие газ при взаимодействии компонентов композиции.
37. Синхронизация процессов при вспенивании реактопластов.
38. Полиакрилимидные пены.
39. Анализ предельной степени имидизации .
40. Физко-механические свойства пеноматериалов и способы их определения.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

Пример билета для зачёта с оценкой:

«Утверждаю» Профессор Кафедры Сколтеха Травень В.Ф. (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Современные композиционные материалы	
Билет № __	
1. Цели создания ПКМ и их отличительные особенности.	
2. Основные расчетные параметры гидроскрепления.	
3. Варианты процесса формирования холста.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. В.В. Киреев Высокомолекулярные соединения, М.: изд. «Юрайт», 2016г., 602 с.
2. В.А. Дятлов, С.Н. Филатов Применение ИК-спектроскопии с фурье-преобразованием для исследования полимеров // М-во образования и науки Российской Федерации, Российский химико-технологический ун-т им. Д. И. Менделеева. Москва, 2011, 60 с.
3. В.В. Киреев, В.А. Дятлов Методы определения молекулярных масс и полидисперсности полимеров // М-во образования и науки Российской Федерации, Российский химико-технологический ун-т им. Д. И. Менделеева. Москва, 2007, 54 с.

Б. Дополнительная литература

1. Г.Е. Заикин Масс-спектропия синтетических полимеров

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

Раздаточный иллюстративный материал к лекциям. Презентации к лекциям Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Полнотекстовые информационные ресурсы:

Издательство ELSEVIER на платформе Science Direct.

Доступ к коллекциям «**CHEMISTRY**» и «**CHEMICAL ENGINEERING**» (152 журнала) с 2002 г. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://www.sciencedirect.com>.

Издательство American Chemical Society (ACS)

Издает самые цитируемые химические журналы, по данным **ISI Journal Scitation Reports**. Журналы по основным разделам химии и смежным областям знаний, включая химию широкого профиля, медицинскую химию, физическую химию, органическую химию, а также биохимию, биотехнологию и т.д. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://pubs.acs.org>.

Издательство Taylor & Francis

Более 1300 журналов по всем областям знаний, в том числе более 300 по техническим и естественным наукам. Охват с 1997 года по настоящее время. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://www.informaworld.com>.

Международная издательская компания **Nature Publishing Group (NPG)** Доступ к журналам:

- «Nature» - с 1997 г. — наиболее прославленное научное издание широкого профиля, обладающее к тому же самым высоким индексом цитирования;
- «Nature Materials» - с 2002 г.
- «Nature Nanotechnology» - с 2006 г.
- "Nature Chemistry" - с 2010 г.

Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://www.nature.com>.

American Institute of Physics (AIP)

Тематические рубрики изданий включают основные разделы физики и смежных областей знаний - оптику, акустику, ядерную и математическую физику, физику жидкости и газа, техническую механику, вычислительную технику и т.д.

На сайте размещены журналы нескольких издательств (поиск можно проводить по всем ресурсам), однако для полнотекстового доступа открыты только журналы Американского института физики.

Открыты все архивы. Глубина архива варьируется от издания к изданию.

Доступ по IP-адресам РХТУ.

Адрес для работы: <http://scitation.aip.org>.

Издательство **Wiley-Blackwell**

Предоставляет доступ к более чем 1300 журналам.

Ресурс охватывает широкий спектр тематических направлений по всем областям знаний, в том числе известные журналы по химии, материаловедению, керамике, полимерам, взрывчатым веществам, экономике и бизнесу, медицине, гуманитарным и социальным наукам.

Глубина архива (в основном) с 1996 года. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://www3.interscience.wiley.com>.

Издательство **SPRINGER**

Доступ к электронным архивам журналов и электронным книгам. Журналы по всем областям знаний. Адрес для работы: <http://www.springerlink.com>. Доступ по IP-адресам РХТУ.

Журнал **SCIENCE**

Один из ведущих мультидисциплинарных научных журналов, публикуется Американской ассоциацией по развитию науки (AAAS), содержит обзоры новейших разработок в естественных и прикладных науках, освещает новости научного мира и комментирует их.

Охват — с 1997 г. по настоящее время.

Доступ по IP-адресам РХТУ.

Адрес для работы: <http://www.science.com>

The Royal Society of Chemistry

Полные тексты статей журналов Королевского химического общества (Великобритания) и базы данных. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес: <http://www.rsc.org/Publishing/Journals/Index.asp>

Российская научная электронная библиотека (<http://www.elibrary.ru>)

Электронные версии журналов российских и зарубежных научных издательств. Доступ по IP-адресам РХТУ. .

Дополнительные учебно-методические материалы размещены на сайте факультета естественных наук <http://fen.distant.ru/asp>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 200);
- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 300);

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной

литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Современные композиционные материалы»* проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Перечень материально-технического обеспечения включает: лекционные учебные аудитории (оборудованные видеопроекционным оборудованием для презентаций, экраном, и имеющие выход в Интернет), помещения для проведения семинарских и практических занятий (оборудованные учебной мебелью), библиотеку (имеющую рабочие компьютерные места для аспирантов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет). При использовании электронных изданий университет обеспечивает каждого обучающегося во время самостоятельной подготовки рабочим местом в компьютерном классе с выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Материально-техническая база кафедры химической технологии пластических масс включает:

– информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине *«Современные композиционные материалы»*; методические рекомендации к практическим занятиям.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

– компьютерные презентации к лекционным курсам, макеты технологических установок; наборы образцов полимерных и композиционных материалов и демонстрационных изделий из них;

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Введение. Технология полимерных композиционных материалов (ПКМ).	<i>Знает:</i> – основные области применения нетканых материалов различных типов; – основные типы используемого технологического оборудования и принцип их работы; <i>Умеет:</i> – выбирать последовательность методов для исчерпывающего анализа химических, физико-химических и механических свойств ПКМ; – выбрать связующие и тип наполнителя для создания ПКМ и ПНМ с требуемыми потребительскими свойствами; <i>Владеет:</i> – способностью оценивать достоверность и точность анализа и его результатов;	Оценка за контрольную работу №1 (6 семестр) Оценка за Зачёт с оценкой (6 семестр)
Раздел 2. Нетканые материалы (НМ)	<i>Знает:</i> – технологии и оборудование, используемое при производстве полимерных нетканых материалов (ПНМ); – существующие физико-химические и спектральные методы исследования структуры и свойств полимерных композиционных материалов (ПКМ) и их специфику; <i>Умеет:</i> – определять возможную причину технологического брака и уметь ее устранить; – контролировать основные параметры технологического режима производства ПНМ; <i>Владеет:</i> – навыками работы на рутинных приборах общего пользования. – прогностическими и	Оценка за контрольную работу №2 (6 семестр) Оценка за Зачёт с оценкой (6 семестр)

	аналитическими методами определения основных физическо-механических свойств композиционных и нетканых материалов	
Раздел 3. Конструкционные газонаполненные ПКМ для аэрокосмической промышленности	<i>Знает:</i> – физические и принципы, лежащие в основе каждого метода получения НМ и ПКМ; – существующие физико-химические и спектральные методы исследования структуры и свойств полимерных композиционных материалов (ПКМ) и их специфику; <i>Умеет:</i> – правильно выбрать марку исходного полимера и вспомогательных компонентов для производства требуемого нетканого материала – существующие физико-химические и спектральные методы исследования структуры и свойств полимерных композиционных материалов (ПКМ) и их специфику; <i>Владеет:</i> – методами расчета основных свойств композиционных материалов в зависимости от свойств наполнителя и связующих	Оценка за контрольную работу №3 (6 семестр) Оценка за Зачёт с оценкой (6 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

– Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

– Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ

им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

– Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

« _____ »

основной образовательной программы

« _____ »

код и наименование направления подготовки (специальности)

« _____ »

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Современный неорганический синтез»

Направление подготовки 04.03.01.Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена профессором кафедры Сколтеха д.х.н. Кузнецовым В.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии»** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестров.

Дисциплина **«Современный неорганический синтез»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области теоретической неорганической химии, физической химии.

Цель дисциплины – сформировать у учащихся целостное представление о современных методах неорганического синтеза и сформировать необходимые экспериментальные навыки в области неорганического синтеза

Задачи дисциплины –

- расширение и углубление общетеоретических знаний по химии, представлений о закономерностях протекания реакций, о составе, строении и свойствах неорганических веществ

- ознакомление студентов с методами синтеза различных классов соединений на основе теоретических знаний

- развитие общих лабораторных приемов работы, навыков работы с приборами

- обучение технике проведения неорганического синтеза, планированию синтеза, методам идентификации неорганических соединений, работе со справочными пособиями.

Дисциплина **«Современный неорганический синтез»** преподается в 7 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н) (уровень квалификации – 6) Корректировка и разработка методик комплексного анализа структуры и свойств наноструктурированных композиционных материалов</i>

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- способы активации реакционной смеси. Влияние температуры на скорость химических реакции.
- основные методы выделения веществ из реакционных смесей. Использование фазовых диаграмм в неорганическом синтезе.
- типы химических реакций, используемых в неорганическом синтезе
- общие принципы получения металлов, неметаллов и основных классов неорганических соединений.

Уметь:

- выбрать рациональный способ синтеза соединения
- пользоваться физико-химическими диаграммами, разработать оптимальную стратегию выделения и очистки соединения
- разработать и собрать прибор для получения соединения, осуществить синтез неорганического соединения на практике

Владеть:

- современными приемами неорганического синтеза, получения и очистки веществ

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3.6	128	96
Лекции	1.8	64	48
Практические занятия (ПЗ)	1.8	64	48
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1.4	52	39
Контактная самостоятельная работа	1.4	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		52	39
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0.4	0.3
Подготовка к экзамену.		35.6	26.7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Лаб. работы	Сам. работа
1.	Раздел 1. Теоретические основы неорганического синтеза	39	14	14		11
1.1	Предмет, цель и задачи неорганического синтеза	5,5	2	2		1,5
1.2	Выделение веществ из гомогенных и гетерогенных смесей	11	4	4		3
1.3	Декантация	11	4	4		3
1.4	Лиофилизация.	11,5	4	4		3,5
2.	Раздел 2. Реакции синтеза неорганических веществ	45	16	16		13
2.1	Основные типы реакций неорганического синтеза	11,5	4	4		3,5
2.2	Гидролиз и его значение в синтезе неорганических соединений	11,5	4	4		3,5
2.3	Окислительно-восстановительные реакции в неорганическом синтезе	11	4	4		3
2.4	Реакции в твёрдой фазе	5,5	2	2		1,5
2.5	Реакции с участием газов	5,5	2	2		1,5
3.	Раздел 3. Общие принципы синтеза неорганических соединений	45	16	16		13
3.1	Синтез кислот, оснований и солей	11	4	4		3
3.2	Получение галогенидов, сульфатов, сульфитов, сульфидов	11	4	4		3
3.3	Получение нитратов, карбонатов, основных, двойных и комплексных солей	11,5	4	4		3,5
3.4	Получение кислот, щелочей и нерастворимых оснований	11,5	4	4		3,5
4.	Раздел 4. Получение металлов и неметаллов в неорганическом синтезе	51	18	18		15
4.1	Восстановление оксидов	11	4	4		3
4.2	Восстановление металлов	11.	4	4		3
4.3	Электролиз расплавов и растворов солей	11	4	4		3
4.4	Получение высокочистых металлов	6	2	2		2
4.5	Получение хлора, брома, йода, кислорода, азота, водорода	11	4	4		3
	ИТОГО	180	64	64		52
	Экзамен (если предусмотрен УП)	36				
	ИТОГО	216				

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Теоретические основы неорганического синтеза

Предмет, цель и задачи неорганического синтеза; основные этапы синтеза неорганических веществ. Подготовка и смешивание реагентов. Активация реакционной смеси, влияние температуры и давления на скорость реакции. Выделение веществ из гомогенных и гетерогенных смесей. Декантация. Использование фазовых диаграмм для выбора оптимального метода выделения продукта реакции. Очистка целевого продукта. Высушивание и хранение веществ. Лиофилизация.

Раздел 2. Реакции синтеза неорганических веществ

Основные типы реакций неорганического синтеза. Использование реакций ионного обмена в практике неорганического синтеза. Гидролиз и его значение в синтезе неорганических соединений. Золь-гель процесс. Применение окислительно-восстановительных реакций в неорганическом синтезе. Важнейшие окислители и восстановители. Реакции комплексообразования и их использование для получения неорганических веществ. Реакции в твёрдой фазе. Реакции с участием газов.

Раздел 3. Общие принципы синтеза неорганических соединений

Синтез кислот, оснований и солей. Получение галогенидов, сульфатов, сульфитов, сульфидов, нитратов, карбонатов, основных, двойных и комплексных солей, кислот, щелочей и нерастворимых оснований – конкретные примеры и условия синтеза.

Раздел 4. Получение металлов и неметаллов в неорганическом синтезе

Восстановление оксидов, хлоридный метод, металлотермия. Восстановление металлов из расплавов и растворов солей электрохимическим методом. Электролиз расплавов и растворов солей. Транспортные реакции. Получение высокочистых металлов. Получение хлора, брома, йода, кислорода, азота, водорода в лаборатории и в промышленном масштабе.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	– способы активации реакционной смеси. Влияние температуры на скорость химических реакции.	+	+	+	+
2	– основные методы выделения веществ из реакционных смесей. Использование фазовых диаграмм в неорганическом синтезе.	+		+	+
3	– типы химических реакций, используемых в неорганическом синтезе		+	+	+
4	– общие принципы получения металлов, неметаллов и основных классов неорганических соединений.			+	+
	Уметь:				
5	– выбрать рациональный способ синтеза соединения	+	+	+	+
6	– пользоваться физико-химическими диаграммами, разработать оптимальную стратегию выделения и очистки соединения	+	+	+	+
7	– разработать и собрать прибор для получения соединения, осуществить синтез неорганического соединения на практике	+	+	+	+
	Владеть:				
8	– современными приемами неорганического синтеза, получения и очистки веществ.	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Профессиональные</u> компетенции и индикаторы их достижения:					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			

11	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Предмет, цель и задачи неорганического синтеза	2
2	1	Выделение веществ из гомогенных и гетерогенных смесей	4
3	1	Декантация	4
4	1	Лиофилизация	4
5	2	Основные типы реакций неорганического синтеза	4
6	2	Гидролиз и его значение в синтезе неорганических соединений	4
7	2	Окислительно-восстановительные реакции в неорганическом синтезе	4
8	2	Реакции в твёрдой фазе	2
9	2	Реакции с участием газов	2
10	3	Синтез кислот, оснований и солей	4
11	3	Получение галогенидов, сульфатов, сульфитов, сульфидов	4
12	3	Получение нитратов, карбонатов, основных, двойных и комплексных солей	4
13	3	Получение кислот, щелочей и нерастворимых оснований	4
14	4	Восстановление оксидов	4
15	4	Восстановление металлов	4
16	4	Электролиз расплавов и растворов солей	4
17	4	Получение высокочистых металлов	2
18	4	Получение хлора, брома, йода, кислорода, азота, водорода	4

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторные занятия по дисциплине «*Современный неорганический синтез*» не предусмотрены

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **экзамена** (7 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения,

предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме **экзамен** (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (7 семестр) составляет 30 баллов за каждую.

Раздел 1,2 Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

1. Высушивание веществ в неорганическом синтезе. Применение фазовых диаграмм. Лиофилизация.
2. Использование окислительно-восстановительных реакций в неорганическом синтезе. Важнейшие окислители в растворах (кислых и щелочных) и твердой фазе.

Раздел 3,4 Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

1. Получение летучих ковалентных галогенидов неметаллов и металлов в высоких степенях окисления.
2. Получение щелочных металлов вакуумотермическим методом.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (7 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса.

1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Основные этапы синтеза неорганических веществ.
2. Подготовка и смешивание реагентов.
3. Активация реакционной смеси, влияние температуры и давления на скорость реакции.
4. Выделение веществ из гомогенных и гетерогенных смесей.
5. Декантация.

- 6.Использование фазовых диаграмм для выбора оптимального метода выделения продукта реакции.
- 7.Очистка целевого продукта.
- 8.Высушивание и хранение веществ.
- 9.Лиофилизация.
- 10.Основные типы реакций неорганического синтеза.
- 11.Использование реакций ионного обмена в практике неорганического синтеза.
- 12.Гидролиз и его значение в синтезе неорганических соединений.
- 13.Золь-гель процесс.
- 14.Применение окислительно-восстановительных реакций в неорганическом синтезе.
- 15.Важнейшие окислители и восстановители.
- 16.Реакции комплексообразования и их использование для получения неорганических веществ.
- 17.Реакции в твёрдой фазе.
- 18.Реакции с участием газов.
- 19.Синтез кислот, оснований и солей.
- 20.Получение галогенидов, сульфатов, сульфитов, сульфидов, нитратов, карбонатов, основных, двойных и комплексных солей, кислот, щелочей и нерастворимых оснований – конкретные примеры и условия синтеза.
- 21.Восстановление оксидов, хлоридный метод, металлотермия.
- 22.Восстановление металлов из расплавов и растворов солей электрохимическим методом.
- 23.Электролиз расплавов и растворов солей.
- 24.Транспортные реакции. Получение высокочистых металлов.
- 25.Получение хлора, брома, йода, кислорода, азота, водорода в лаборатории и в промышленном масштабе.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (7 семестр).

Экзамен по дисциплине «*Современный неорганический синтез*» проводится в 7 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Современный неорганический синтез	
Билет № 1	
1. Физико-химические основы дистилляции. Использование фазовых диаграмм для	

- выделения веществ из реакционной смеси методом дистилляции.
2. Синтез безводного хлорида алюминия. Схема прибора и условия проведения процесса.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Неорганическая химия. Практикум/ Е.И. Ардашникова, Е.Д. Демидова, В.А. Алешин; под ред. А.В. Шевелькова. – М. Лаборатория знаний. 2021. – 473 с., ил.

Б. Дополнительная литература

1. Руководство по неорганическому синтезу. Т. 2./ под ред. Г. Брауэра. М. : Мир. 1985. □ 338 с.
2. Синтезы неорганических соединений. Т. 2. / под ред. У. Джолли. М. : Мир. 1967. – 439 с.
3. Карякин Ю. В., Ангелов И. И. Чистые химические вещества. М. : Химия. 1974. – 408 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- Реферативный журнал «Химия» (РЖХ) ISSN 0869-5873;

Политематические базы данных (БД):

- США: CAPLUS; COMPENDEX;
- Великобритания: INSPEC;
- Франция: PASCAL.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 8, (общее число слайдов – 235);
- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 200);
- банк тестовых заданий для итогового контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 200).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Современный неорганический синтез»* проводятся в форме лекционных, семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – способы активации реакционной смеси. Влияние температуры на скорость химических реакции. – основные методы выделения веществ из реакционных смесей. Использование фазовых диаграмм в неорганическом синтезе. <i>Умеет:</i> – выбрать рациональный способ синтеза соединения – пользоваться физико-химическими диаграммами, разработать оптимальную стратегию выделения и очистки соединения – разработать и собрать прибор для получения соединения, осуществить синтез неорганического соединения на практике <i>Владеет:</i> – современными приемами неорганического синтеза, получения и очистки веществ.	Оценка за контрольную работу №1 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)
Раздел 2. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – способы активации реакционной смеси. Влияние температуры на скорость химических реакции. – типы химических реакций, используемых в неорганическом синтезе <i>Умеет:</i> – выбрать рациональный способ синтеза соединения – пользоваться физико-химическими диаграммами, разработать оптимальную стратегию выделения и очистки соединения – разработать и собрать прибор для получения соединения, осуществить синтез неорганического соединения на практике <i>Владеет:</i> – современными приемами неорганического синтеза, получения и очистки веществ.	Оценка за контрольную работу №1 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)

Раздел 3. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – способы активации реакционной смеси. Влияние температуры на скорость химических реакции. – основные методы выделения веществ из реакционных смесей. Использование фазовых диаграмм в неорганическом синтезе. – типы химических реакций, используемых в неорганическом синтезе – общие принципы получения металлов, неметаллов и основных классов неорганических соединений. <i>Умеет:</i> – выбрать рациональный способ синтеза соединения – пользоваться физико-химическими диаграммами, разработать оптимальную стратегию выделения и очистки соединения – разработать и собрать прибор для получения соединения, осуществить синтез неорганического соединения на практике <i>Владеет:</i> – современными приемами неорганического синтеза, получения и очистки веществ.	Оценка за контрольную работу №2 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)
Раздел 4. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – способы активации реакционной смеси. Влияние температуры на скорость химических реакции. – основные методы выделения веществ из реакционных смесей. Использование фазовых диаграмм в неорганическом синтезе. – типы химических реакций, используемых в неорганическом синтезе <i>Умеет:</i> – выбрать рациональный способ синтеза соединения – пользоваться физико-химическими диаграммами, разработать оптимальную стратегию выделения и очистки соединения – разработать и собрать прибор для получения соединения, осуществить синтез неорганического соединения на практике <i>Владеет:</i>	Оценка за контрольную работу №2 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)

	– современными приемами неорганического синтеза, получения и очистки веществ.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ М. А. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Спектральные методы исследования в химии и материаловедении»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – « Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры Сколтеха к.х.н. И. В. Ивановым и доцентом кафедры Сколтеха к.х.н. А. Н. Морозовым.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии»** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение двух семестров.

Дисциплина **«Спектральные методы исследования в химии и материаловедении»** относится части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области общей физики.

Цель дисциплины – ознакомление обучающихся с основными принципами современных методов исследования веществ и материалов.

Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний и представлений о фундаментальных законах и основных методах исследования физико-химических свойств и структуры сложных веществ и материалов;
- привитие навыков применения теоретических знаний для решения практических задач;

Дисциплина **«Спектральные методы исследования в химии и материаловедении»** преподается в 4 и 5 семестрах. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6.Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономичных и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами
			ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	
			ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества;
- методы исследования строения и физико-химических свойств, а также оборудование и приборы проведения таких исследований;
- специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости;
- критерии оценки статистической значимости экспериментальных данных;

Уметь:

- планировать стратегию установления строения вещества;
- рационально сочетать различные методы исследования строения вещества;
- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества;
- использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты, готовить образцы для проведения измерений

Владеть:

- способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;
- методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества;
- практическими навыками использования современных приборов и методик для исследования химических соединений различной природы, проведения и организации экспериментов и испытаний, обработки и анализа результатов.
- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических методов исследования строения вещества.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего		Семестр			
			4 семестр		5 семестр	
	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	9	324	3	108	6	216
Контактная работа – аудиторные занятия:	5,4	192	1,8	64	3,6	128
Лекции	2,7	96	0,9	32	1,8	64
Практические занятия (ПЗ)	2,7	96	0,9	32	1,8	64
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-	-	-	-
Самостоятельная работа	2,6	96	1,2	44	1,4	52
Контактная самостоятельная работа	2,6	0,4	1,2	0,4	1,4	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		95,6		43,6		52
Виды контроля:						
Зачёт с оценкой			+	+	-	-
Экзамен	1	36	-	-	1	36
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	-	-	1	0,4
Подготовка к экзамену.		35,6		-		35,6
Вид итогового контроля:			Зачёт с оценкой		Экзамен	

Вид учебной работы	Всего		Семестр			
			4 семестр		5 семестр	
	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	9	243	3	81	6	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	5,4	145,8	1,8	48,6	3,6	97,2
Лекции	2,7	72,9	0,9	24,3	1,8	48,6
Практические занятия (ПЗ)	2,7	72,9	0,9	24,3	1,8	48,6
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-	-	-	-
Самостоятельная работа	2,6	70,8	1,2	33	1,4	37,8
Контактная самостоятельная работа	2,6	0,3	1,2	0,3	1,4	
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		40,5		32,7		37,8
Виды контроля:						
Зачёт с оценкой			+	+	-	-
Экзамен	1	27	-	-	1	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,3	-	-	1	0,3
Подготовка к экзамену.		26,7		-		26,7
Вид итогового контроля:			Зачёт с оценкой		Экзамен	

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Лаб. работы	Сам. работа
	4 семестр					
1.	Раздел 1.ВВЕДЕНИЕ	39	12	12		15
1.1	Общая характеристика и классификация методов исследования	13	4	4		5
1.2	Природа электромагнитного излучения.	13	4	4		5
1.3	Классификация спектральных методов по длинам волн	13	4	4		5
2.	Раздел 2. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ	69	20	20		29
2.1	Области применения масс-спектрометрии	7	2	2		3
2.2	Методы ионизации молекул	7	2	2		3
2.3	Основные характеристики масс-спектрометров	7	2	2		3
2.4	Теория ионизации молекул	7	2	2		3
2.5	Типы ионов	7	2	2		3
2.6	Структурно-аналитические задачи	34	10	10		14
	ИТОГО		32	32		44
	5 семестр					
3.	Раздел 3. СПЕКТРОСКОПИЯ В ВИДИМОЙ И УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ (УФ) ОБЛАСТЯХ	68	24	24		20
3.1	Техника спектроскопии в видимой и УФ областях	17	6	6		5
3.2	Спектры поглощения в видимой и УФ-областях	17	6	6		5
3.3	Теория поля лигандов	17	6	6		5
3.4	Люминесценция	17	6	6		5
4	Раздел 4. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ.	28	10	10		8
4.1	Дисперсия оптического вращения.	11	4	4		3
4.2	Оптический круговой дихроизм	17	6	6		5
5	Раздел 5. КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ	51	18	18		15
5.1	Квантовомеханический подход	17	6	6		5
5.2	Инфракрасная спектроскопия .	17	4	4		4
5.3	Спектроскопия комбинационного рассеяния	17	4	4		3
5.4	Специфичность колебательных спектров		4	4		3
6	Раздел 6.ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС	33	12	12		9

6.1	Явление ядерного магнитного резонанса.	11	4	4		3
6.2	Динамический ЯМР.	11	4	4		3
6.3	Двойной резонанс.	11	4	4		3
	ИТОГО	180	64	64		52
	Экзамен	36				
	ИТОГО	216				

4.2 Содержание разделов дисциплины

Семестр 4.

Раздел 1. Введение

1.1. Общая характеристика и классификация методов исследования строения молекул и кристаллов. Методы химические и физические. Методы спектральные и не спектральные. Прямая и обратная задачи.

1.2. Природа электромагнитного излучения. Основные характеристики излучения (частота, длина волны, волновое число). Различные типы взаимодействия излучения с веществом. Спектры испускания, поглощения и рассеяния атомов, ионов, молекул и кристаллов. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение, интенсивность, ширина). Электронные, колебательные, вращательные, спиновые и ядерные переходы как результат различных типов внутриатомных или внутримолекулярных взаимодействий, определяющих соответствующую спектральную область.

1.3. Классификация спектральных методов по длинам волн (гамма-резонанс, рентгеновская, УФ, видимая, ИК, микроволновая, радиоспектроскопия), по природе переходов (ядерные, электронные, колебательные, вращательные спектры, ЯМР, ЭПР, ЯКР), по типу взаимодействия (спектры поглощения, испускания, рассеяния). Энергетические характеристики различных методов. Чувствительность и разрешающая способность метода. Характеристическое время метода. Интеграция методов.

Раздел 2. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ

2.1. Области применения масс-спектрометрии и ограничения метода.

Конструкция и основные типы масс-спектральных приборов. Системы ввода пробы газов, жидкостей и твердых веществ. Источники ионов. Анализаторы масс (магнитные, ионный циклотронный резонанса, времяпролетные). Системы регистрации ионов, система сбора и обработки данных. Спектроскопия активирующих столкновений, МС/МС техника.

2.2. Методы ионизации молекул (ионизация электронами, фото ионизация, полевая ионизация и десорбция, атомная бомбардировка, электроспрей, матрично-активированная лазерная десорбция/ионизация (МАЛДИ), резонансный захват электронов);

2.3. Основные характеристики масс-спектрометров (чувствительность, разрешающая способность, точность измерения масс и интенсивностей пиков, быстродействие).

2.4. Теория ионизации молекул и диссоциации ионов в газовой фазе. Основные положения квазиравновесной теории масс-спектров. Диссоциативная ионизация.

2.5. Типы ионов (положительные, отрицательные, многозарядные, молекулярные, фрагментные), перегруппировки.

2.6. Структурно-аналитические задачи: установление элементного состава и строения молекул; изотопный анализ; качественный и количественный анализ смесей, хроматомасс-спектрометрия; определение микропримесей.

Семестр 5.

Раздел 3. СПЕКТРОСКОПИЯ В ВИДИМОЙ И УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ (УФ) ОБЛАСТЯХ

3.1. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях. Конструкция приборов (монохроматоры, спектрофотометры; однолучевые и двухлучевые приборы). Источники

излучения, оптические материалы, детекторы. Используемые растворители. Способы изображения спектров.

3.2. Спектры поглощения в видимой и УФ-областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Классификация и отнесение электронных переходов в органических молекулах (σ - σ^* , σ - π^* , π - π^* , n - π^* и др. переходы). Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора для электронных переходов. Специфика электронных спектров поглощения различных классов органических соединений. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения. Спектры ароматических соединений. Спектры координационных соединений. d-d-переходы, переходы с переносом заряда.

3.3. Теория поля лигандов. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализе. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Анализ смесей, определение состава комплексов, определения констант диссоциации кислот. Изучение равновесий, изобестические точки. Биологические и биохимические приложения УФ-видимой спектроскопии. Спектры испускания в УФ и видимой области.

3.4. Люминесценция (флуоресценция и фосфоресценция). Фотофизические процессы в молекуле. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Основные характеристики люминесценции, времена жизни возбужденных состояний, квантовый и энергетический выход люминесценции. Закономерности люминесценции (закон Стокса - Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции. Влияние температуры на спектры испускания. Спектры Шпольского. Практическое использование люминесцентного анализа.

Раздел 4. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ.

4.1. Дисперсия оптического вращения. Круговая поляризация луча света. Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света. Спиральная модель оптической активности. Вращательная сила перехода. Условия вращения плоскости поляризации. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона — аномальная дисперсия. Схема эксперимента. Применения к изучению конфигурации и конформации оптически активных веществ. Правило октантов.

4.2. Оптический круговой дихроизм. Уравнение поглощения света. Коэффициент экстинкции и молярного поглощения. Эллиптическая поляризация света. Зависимость оптического кругового дихроизма от длины волны. Схема измерений кругового дихроизма. Область применения в стереохимии и электронном строении оптически активных веществ. Сравнение с дисперсией оптического вращения и УФ спектроскопией.

Магнитный КД. Физические основы метода и параметры. Преимущества и трудности метода.

Раздел 5. КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

5.1. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Колебания двухатомных молекул. Гармоническое и ангармоническое приближение. Факторы влияющие на частоту колебания — масса атомов и силовые коэффициенты. Колебания многоатомных молекул. Число колебаний. Основные колебания, обертоны и составные частоты. Частоты и формы колебаний. Естественные координаты. Нормальные колебания. Классификация молекулярных колебаний по симметрии. Определение числа колебаний для разных типов симметрии.

5.2. Два основных метода изучения колебательных спектров: инфракрасная спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния (КР).

Правила отбора и интенсивность полос в ИК поглощении и в спектрах КР. Изменение дипольного момента и поляризуемости молекул. Сравнение методов ИК-спектроскопии и КР для исследования молекулярных структур. Поляризация полос в спектрах КР. Сопоставление данных ИК и КР спектров для определения структуры молекул. Влияние агрегатного состояния и растворителей на спектры. Особенности спектров кристаллов. Статическое и динамическое (давыдовское) расщепление полос в спектрах кристаллов. Резонанс Ферми.

5.3. Характеристичность нормальных колебаний. Ограничения концепции групповых частот. Характеристические частоты различных связей и групп атомов в молекуле. Характеристические колебания основных классов молекул. Применение колебательных спектров для определения структур органических, неорганических и координационных соединений. Исследования химических процессов - динамической изомерии, равновесий, кинетики реакций, водородных связей и др. Влияние изотопозамещения на колебательные спектры.

5.4. Специфичность колебательных спектров. Применение методов колебательной спектроскопии для идентификации веществ, для качественного и количественного анализов и другие применения в химии.

Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура ИК спектроскопии, источники излучения, детекторы, прозрачные материалы. Приготовление образцов и методы измерения спектров. Инфракрасные фурье-спектрометры. Преимущества фурье-спектрометров по сравнению с классическими спектральными приборами.

Аппаратура спектроскопии КР, источники света, детекторы. Преимущества лазерных источников возбуждения.

Раздел 6. ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС

6.1. Явление ядерного магнитного резонанса. Квантово-механическое и классическое описание явления. Уравнение резонанса. Понятие химического сдвига в спектроскопии ЯМР, константа экранирования и ее составляющие. Эталоны в ЯМР. Понятие спин-спинового взаимодействия в спектроскопии ЯМР, константы спин-спинового взаимодействия и их связь со строением молекул.

Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР. Понятие о спин-решеточной и спин-спиновой релаксации. Экспериментальное определение времен релаксации T_1 и T_2 .

6.2. Понятие о динамическом ЯМР, примеры динамических процессов, исследованных методом ДЯМР. Временная шкала метода ДЯМР.

Устройство простейшего и современного ЯМР спектрометров, СВ-и импульсная методики регистрации спектров ЯМР.

Проявление хиральности в спектрах ЯМР. Гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы. Классификация спиновых систем в ЯМР, правила анализа первого порядка, слабо- и сильносвязанные спиновые системы, знаки КССВ.

Химические сдвиги гетероядер и константы спин-спинового взаимодействия с участием гетероядер (^{13}C , ^{19}F , ^{31}P , переходные и непереходные металлы). Эталоны для определения химических сдвигов гетероядер.

6.3. Эксперименты по двойному резонансу. Ядерный эффект Оверхаузера. Одномерные ЯМР эксперименты, использующие сложные импульсные последовательности (INEPT, DEPT, JMODECHO). Понятие о двумерной корреляционной спектроскопии ЯМР, основные методики – ^1H , ^1H и ^{13}C , ^1H COSY, NOESY, EXSY.

ЯМР парамагнитных соединений. Динамическая и химическая поляризация ядер.
Твердотельная спектроскопия ЯМР.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5	Раздел 6
	Знать:						
1	-базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества;	+	+	+	+	+	+
2	-методы исследования строения и физико-химических свойств, а также оборудование и приборы проведения таких исследований;	+	+	+	+	+	+
	- специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости;	+	+	+	+	+	+
	- критерии оценки статистической значимости экспериментальных данных;	+	+	+	+	+	+
	Уметь:						
3	- планировать стратегию установления строения вещества;	+	+	+	+	+	+
4	- рационально сочетать различные методы исследования строения вещества;	+	+	+	+	+	+
5	- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества;			+	+	+	+
6	- использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты, готовить образцы для проведения измерений			+	+	+	+
	Владеть:						
7	- способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;	+	+	+	+	+	+
8	- методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества;	+	+	+	+	+	+
9	- практическими навыками использования современных приборов и методик для исследования химических соединений различной природы, проведения и организации экспериментов и испытаний, обработки и анализа результатов.			+	+	+	+
10	- методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических методов исследования строения вещества.			+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>							
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК					

11	ПК-6.Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+	+	+	+
		ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+	+	+	+
		ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
4 семестр			
1	1	Общая характеристика и классификация методов исследования	4
2	1	Природа электромагнитного излучения.	4
3	1	Классификация спектральных методов по длинам волн	4
4	2	Области применения масс-спектрометрии	2
5	2	Методы ионизации молекул	2
6	2	Основные характеристики масс-спектрометров	2
7	2	Теория ионизации молекул	2
8	2	Типы ионов	2
9	2	Структурно-аналитические задачи	2
5 семестр			
10	3	Техника спектроскопии в видимой и УФ областях	6
11	3	Спектры поглощения в видимой и УФ-областях	6
12	3	Теория поля лигандов	6
13	3	Люминесценция	6
14	4	Дисперсия оптического вращения.	4
15	4	Оптический круговой дихроизм	6
16	5	Квантовомеханический подход	6
17	5	Инфракрасная спектроскопия .	4
18	5	Спектроскопия комбинационного рассеяния	4
19	5	Специфичность колебательных спектров	4
20	6	Явление ядерного магнитного резонанса.	4
21	6	Динамический ЯМР.	4
22	6	Двойной резонанс.	4

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине «*Спектральные методы исследования в химии и материаловедении*» не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;

- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *зачёта с оценкой* (4 семестр) и *экзамена* (5 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 6 контрольных работ (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (4 семестр) составляет 30 баллов за каждую. Максимальная оценка за контрольные работы 3-6 (5 семестр) составляет 15 баллов за каждую работу.

Семестр 4.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

Техника спектроскопии в видимой и УФ областях. Конструкция приборов

Вопрос 1.2.

Правила отбора и интенсивность полос в ИК поглощении и в спектрах КР.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни.

Вопрос 2.2.

Симметрия и номенклатура электронных состояний. Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора для электронных переходов.

Семестр 5.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 2 вопроса (1 вопрос- 7 баллов, 2 вопрос-8 баллов).

Вопрос 3.1.

Фотофизические процессы в молекуле. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Основные характеристики люминесценции, времена жизни возбужденных состояний, квантовый и энергетический выход люминесценции..

Вопрос 3.2.

Закономерности люминесценции (закон Стокса - Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции.

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 4. Контрольная работа содержит 2 вопроса (1 вопрос- 7 баллов, 2 вопрос-8 баллов).

Вопрос 4.1.

Правила отбора и интенсивность полос в ИК поглощении и в спектрах КР. Изменение дипольного момента и поляризуемости молекул. Сравнение методов ИК-спектроскопии и КР для исследования молекулярных структур.

Вопрос 4.2.

Поляризация полос в спектрах КР. Сопоставление данных ИК и КР спектров для определения структуры молекул.

Раздел 5. Примеры вопросов к контрольной работе № 5. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 5.1.

Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура ИК спектроскопии, источники излучения, детекторы, прозрачные материалы.

Вопрос 5.2.

Приготовление образцов и методы измерения спектров. Инфракрасные фурье-спектрометры

Раздел 6. Примеры вопросов к контрольной работе № 6. Контрольная работа содержит 2 вопроса (1 вопрос- 7 баллов, 2 вопрос-8 баллов).

Вопрос 6.1.

Проявление хиральности в спектрах ЯМР. Гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы.

Вопрос 6.2.

Классификация спиновых систем в ЯМР, правила анализа первого порядка, слабо- и сильносвязанные спиновые системы, знаки КССВ.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (4 семестр – зачёт с оценкой, 5 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за *зачёт с оценкой* (4 семестр) – 40 баллов, за *экзамен* (5 семестр) – 40 баллов.

8.3.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (4 семестр зачёт с оценкой).

Билет для зачёта включает контрольные вопросы по разделам 1 и 2 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Общая характеристика и классификация методов исследования строения молекул и кристаллов. Методы химические и физические. Методы спектральные и не спектральные. Прямая и обратная задачи.

1. Различные типы взаимодействия излучения с веществом. Спектры испускания, поглощения и рассеяния атомов, ионов, молекул и кристаллов. Важнейшие характеристики спектральных линий (положение, интенсивность, ширина).

2. Конструкция и основные типы масс-спектральных приборов. Системы ввода пробы газов, жидкостей и твердых веществ. Источники ионов. Анализаторы масс (магнитные, времяпролетные, ионный циклотронный резонанс). Системы регистрации ионов, система сбора и обработки данных. Спектроскопия активирующих столкновений, МС/МС техника.

3. Методы ионизации молекул (ионизация электронами, фото ионизация, полевая ионизация и десорбция, атомная бомбардировка, электроспрей, матрично-активированная лазерная десорбция/ионизация (МАЛДИ), резонансный захват электронов);

4. Техника спектроскопии в видимой и УФ областях. Конструкция приборов (монохроматоры, спектрофотометры; однолучевые и двухлучевые приборы). Источники излучения, оптические материалы, детекторы. Используемые растворители. Способы изображения спектров.

5. Спектры поглощения в видимой и УФ-областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул. Классификация и отнесение электронных переходов в органических молекулах.

6. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. Симметрия и номенклатура электронных состояний. Интенсивности полос различных переходов. Правила отбора для электронных переходов.

7. Специфика электронных спектров поглощения различных классов органических соединений. Спектры сопряженных систем и пространственные эффекты в электронных спектрах поглощения. Спектры ароматических соединений.

8. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализе. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Анализ смесей, определение состава комплексов, определения констант диссоциации кислот.

9. Фотофизические процессы в молекуле. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Основные характеристики люминесценции, времена жизни возбужденных состояний, квантовый и энергетический выход люминесценции. Закономерности люминесценции (закон Стокса - Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции.

10. Дисперсия оптического вращения. Круговая поляризация луча света. Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света. Спиральная модель оптической активности. Вращательная сила перехода. Условия вращения плоскости поляризации.
11. Оптический круговой дихроизм. Уравнение поглощения света. Коэффициент экстинкции и молярного поглощения. Эллиптическая поляризация света. Зависимость оптического кругового дихроизма от длины волны. Схема измерений кругового дихроизма. Область применения в стереохимии и электронном строении оптически активных веществ. Сравнение с дисперсией оптического вращения и УФ спектроскопией.
12. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Колебания двухатомных молекул. Гармоническое и ангармоническое приближение. Факторы влияющие на частоту колебания – масса атомов и силовые коэффициенты.
13. Колебания многоатомных молекул. Число колебаний. Основные колебания, обертоны и составные частоты. Частоты и формы колебаний. Естественные координаты. Нормальные колебания.
14. Классификация молекулярных колебаний по симметрии. Определение числа колебаний для разных типов симметрии.
15. Правила отбора и интенсивность полос в ИК поглощении и в спектрах КР. Изменение дипольного момента и поляризуемости молекул. Сравнение методов ИК-спектроскопии и КР для исследования молекулярных структур. Поляризация полос в спектрах КР. Сопоставление данных ИК и КР спектров для определения структуры молекул.
16. Характеристичность нормальных колебаний. Ограничения концепции групповых частот. Характеристические частоты различных связей и групп атомов в молекуле. Характеристические колебания основных классов молекул. Применение колебательных спектров для определения структур органических, неорганических и координационных соединений.
17. Специфичность колебательных спектров. Применение методов колебательной спектроскопии для идентификации веществ, для качественного и количественного анализов и другие применения в химии.

8.3.2 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (5 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 3-6 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Спектры координационных соединений. d-d-переходы, переходы с переносом заряда. Теория поля лигандов.
2. Применение электронных спектров поглощения в качественном, структурном и количественном анализах. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Анализ смесей, определение состава комплексов, определения констант диссоциации кислот. Изучение равновесий, изобестические точки. Биологические и биохимические приложения УФ-видимой спектроскопии.
3. Фотофизические процессы в молекуле. Внутренняя и интеркомбинационная конверсия. Основные характеристики люминесценции, времена жизни возбужденных состояний, квантовый и энергетический выход люминесценции. Закономерности люминесценции (закон Стокса - Ломмеля, правило Левшина, закон Вавилова). Тушение люминесценции. Влияние температуры на спектры испускания. Спектры Шпольского. Практическое использование люминесцентного анализа.
4. Дисперсия оптического вращения. Круговая поляризация луча света. Вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света. Спиральная модель оптической активности. Вращательная сила перехода. Условия вращения плоскости поляризации. Дисперсия оптического вращения. Эффект Коттона — аномальная дисперсия. Схема

эксперимента. Применения к изучению конфигурации и конформации оптически активных веществ. Правило октантов.

5. Оптический круговой дихроизм. Уравнение поглощения света. Коэффициент экстинкции и молярного поглощения. Эллиптическая поляризация света. Зависимость оптического кругового дихроизма от длины волны. Схема измерений кругового дихроизма. Область применения в стереохимии и электронном строении оптически активных веществ. Сравнение с дисперсией оптического вращения и УФ спектроскопией.

6. Магнитный круговой дихроизм. Физические основы метода и параметры. Преимущества и трудности метода.

7. Квантовомеханический подход к описанию колебательных спектров. Колебания двухатомных молекул. Гармоническое и ангармоническое приближение. Факторы влияющие на частоту колебания – масса атомов и силовые коэффициенты.

8. Колебания многоатомных молекул. Число колебаний. Основные колебания, обертоны и составные частоты. Частоты и формы колебаний. Естественные координаты. Нормальные колебания.

9. Классификация молекулярных колебаний по симметрии. Определение числа колебаний для разных типов симметрии.

10. Правила отбора и интенсивность полос в ИК поглощении и в спектрах КР. Изменение дипольного момента и поляризуемости молекул. Сравнение методов ИК-спектроскопии и КР для исследования молекулярных структур. Поляризация полос в спектрах КР. Сопоставление данных ИК и КР спектров для определения структуры молекул.

11. Характеристичность нормальных колебаний. Ограничения концепции групповых частот. Характеристические частоты различных связей и групп атомов в молекуле. Характеристические колебания основных классов молекул. Применение колебательных спектров для определения структур органических, неорганических и координационных соединений.

12. Специфичность колебательных спектров. Применение методов колебательной спектроскопии для идентификации веществ, для качественного и количественного анализов и другие применения в химии.

13. Техника и методики ИК спектроскопии и спектроскопии КР. Аппаратура ИК спектроскопии, источники излучения, детекторы, прозрачные материалы. Приготовление образцов и методы измерения спектров. Инфракрасные фурье-спектрометры. Преимущества фурье-спектрометров по сравнению с классическими спектральными приборами.

14. Аппаратура спектроскопии КР, источники света, детекторы. Преимущества лазерных источников возбуждения.

15. Явление ядерного магнитного резонанса. Квантово-механическое и классическое описание явления. Уравнение резонанса. Понятие химического сдвига в спектроскопии ЯМР, константа экранирования и ее составляющие. Эталоны в ЯМР.

16. Понятие спин-спинового взаимодействия в спектроскопии ЯМР, константы спин-спинового взаимодействия и их связь со строением молекул.

17. Релаксационные процессы в спектроскопии ЯМР. Понятие о спин-решеточной и спин-спиновой релаксации. Экспериментальное определение времен релаксации T1 и T2.

18. Понятие о динамическом ЯМР, примеры динамических процессов, исследованных методом ДЯМР. Временная шкала метода ДЯМР.

19. Устройство простейшего и современного ЯМР спектрометров, СВ-и импульсная методики регистрации спектров ЯМР.

20. Проявление хиральности в спектрах ЯМР. Гомотопные, энантиотопные и диастереотопные группы. Классификация спиновых систем в ЯМР, правила анализа первого порядка, слабо- и сильносвязанные спиновые системы, знаки КССВ.

21. Химические сдвиги гетероядер и константы спин-спинового взаимодействия с участием гетероядер. Эталоны для определения химических сдвигов гетероядер.

22. Эксперименты по двойному резонансу. Ядерный эффект Оверхаузера. Одномерные ЯМР эксперименты, использующие сложные импульсные последовательности. Понятие о двумерной корреляционной спектроскопии ЯМР.

23. ЯМР парамагнитных соединений. Динамическая и химическая поляризация ядер. Твердотельная спектроскопия ЯМР.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (4 семестр) и экзамена (5 семестр).

Зачёт с оценкой по дисциплине «Спектральные методы исследования в химии и материаловедении» проводится в 4 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1 и 2 рабочей программы дисциплины. Билет для **зачёта с оценкой** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **зачёта с оценкой**:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__г	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Спектральные методы исследования в химии и материаловедении	
Билет № 1 1. Характеристики электронных состояний многоатомных молекул: энергия, волновые функции, мультиплетность, время жизни. 2. Спектры поглощения в видимой и УФ-областях как метод исследования электронных спектров многоатомных молекул.	

Экзамен по дисциплине «Спектральные методы исследования в химии и материаловедении» проводится в 5 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 3 -6 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__г	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии»
	04.03.01 Химия Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии »» Спектральные методы исследования в химии и материаловедении
Билет № 1 1. Спектры координационных соединений. d-d-переходы, переходы с переносом заряда. Теория поля лигандов. 2. Аппаратура спектроскопии КР, источники света, детекторы. Преимущества лазерных источников возбуждения.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

- Физические методы исследования в химии / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков - М.Мир,2006
2. Физические методы в химии : в 2 т. Т. 1 / Р. Драго ; пер. с англ. А. А. Соловьянова ; под ред. О. А. Реутова .— М. : Мир, 1981 .— 422 с.
3. Физические методы в химии : в 2 т. Т. 2 : / Р. Драго ; пер. с англ. А. А. Соловьянова ; под ред. О. А. Реутова .— М. : Мир, 1981 .— 456 с.
4. Теория вероятностей и математическая статистика : учеб. пособие для вузов / В. Е. Гмурман .— 12-е изд., перераб. — М. : Юрайт, 2010, 2011 .— 479 с.
5. Масс-спектрометрия в органической химии : учеб. пособие для вузов / А. Т. Лебедев — М. : БИНОМ. Лаб. знаний, 2009 .— 493 с.
6. Методы исследований в экспериментальной физике : учеб. пособие для вузов / М. И. Пергамент .— М. : Интеллект, 2010 .— 304 с.

Б. Дополнительная литература

1. Основы молекулярной спектроскопии : учеб. пособие для вузов / Н. Н. Кудрявцев ; М-во образования РФ, МФТИ .— М. : ВЭПИ, 1990 .— 158 с.
2. Введение в курс спектроскопии ЯМР, Х. Гюнтер ; пер. с англ. Ю. А. Устынюка, Н. М. Сергеева .— М. : Мир, 1984 .— 478 с.
3. Теория и практические приложения метода ЭПР / Дж. Вертц, Дж. Болтон ; пер. с англ. М. Г. Гольфельда ; под ред. Л. А. Блюменфельда .— М. : Мир, 1975 .— 548 с.:
4. Магнетохимия / Р. Карлин ; пер. с англ. С. С. Соболева, Г. И. Лапушкина ; под ред. В. В. Зеленцова .— М. : Мир, 1989 .— 399 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям и семинарам.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://www.rsl.ru> - Российская Государственная Библиотека
- <http://www.gpntb.ru> - Государственная публичная научно-техническая библиотека России
- <http://lib.msu.ru> - Научная библиотека Московского государственного университета
- <http://window.edu.ru> - Полнотекстовая библиотека учебных и учебно-методических материалов
- <http://abc-chemistry.org/ru/> - ABC-Chemistry : Бесплатная научная химическая информация
- <http://www.fips.ru/cdfi/fips2009.dll> - Сайт ФИПС. Информация о патентах
- <http://findebookee.com/> - поисковая система по книгам
- <http://elibrary.ru> - Научная электронная библиотека
- <http://lcweb.loc.go> - Библиотека Конгресса США

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Спектральные методы исследования в химии и материаловедении*» проводятся в форме лекционных и семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Аудитория с доской, компьютером, проектором и экраном.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проектор; экран; аудитория со стационарным комплексом отображения информации с электронного носителя; сканер; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Введение Ядерный магнитный резонанс	<i>Знает:</i> - базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества; - методы исследования строения и физико-химических свойств, а также оборудование и приборы проведения таких исследований; - специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости; <i>Умеет:</i> - планировать стратегию установления строения вещества;	Оценка за контрольную работу №1 (4 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (4 семестр)

	- рационально сочетать различные методы исследования строения вещества; <i>Владеет:</i> -способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества; - методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества;	
Раздел 2. Масс-спектрометрия	<i>Знает:</i> - базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества; - методы исследования строения и физико-химических свойств, а также оборудование и приборы проведения таких исследований; - специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости; <i>Умеет:</i> - планировать стратегию установления строения вещества; - рационально сочетать различные методы исследования строения вещества; <i>Владеет:</i> -способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества; - методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества;	Оценка за контрольную работу №2 (4 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (4 семестр)

Раздел 3. Спектроскопия в видимой и ультрафиолетовой областях	<i>Знает:</i> - базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества; - методы исследования строения и физико-химических свойств, а также оборудование и приборы проведения таких исследований; - специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости; <i>Умеет:</i> - планировать стратегию установления строения вещества; - рационально сочетать различные методы исследования строения вещества; - обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества; - использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты, готовить образцы для проведения измерений <i>Владеет:</i> - способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества; - методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества; - практическими навыками использования современных приборов и методик для исследования химических соединений различной природы, проведения и организации экспериментов и испытаний, обработки и анализа результатов. - методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических методов исследования строения вещества.	Оценка за контрольную работу №3 (5 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (5 семестр)

Раздел 4. Методы исследования оптически активных веществ	<i>Знает:</i> - базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества; - методы исследования строения и физико-химических свойств, а также оборудование и приборы проведения таких исследований; - специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости; <i>Умеет:</i> - планировать стратегию установления строения вещества; - рационально сочетать различные методы исследования строения вещества; - обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества; - использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты, готовить образцы для проведения измерений <i>Владеет:</i> - способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества; - методологией использования современных физико-химических методов изучения строения вещества; - практическими навыками использования современных приборов и методик для исследования химических соединений различной природы, проведения и организации экспериментов и испытаний, обработки и анализа результатов. - методологией сопоставления и критической интерпретации массива данных, полученных всей совокупностью использованных физико-химических методов исследования строения вещества.	Оценка за контрольную работу №4 (5 семестр) Оценка экзамен(5 семестр)

Раздел 5. Колебательная спектроскопия	Знает: - базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества; - методы исследования строения и физико-химических свойств, а также оборудование и приборы проведения таких исследований; - специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости; Умеет: - планировать стратегию установления строения вещества; - рационально сочетать различные методы исследования строения вещества; - обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества; - использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты, готовить образцы для проведения измерений Владеет: - способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;	Оценка за контрольную работу №5 (5семестр) Оценка экзамен(5 семестр)
Раздел 6. Ядерный магнитный резонанс	Знает: - базовые физические и химические принципы, заложенные в основу различных методов исследования строения вещества; - методы исследования строения и физико-химических свойств, а также оборудование и приборы проведения таких исследований; - специфику различных физико-химических методов изучения строения вещества и области их применимости; Умеет: - планировать стратегию установления строения вещества; - рационально сочетать различные методы исследования строения вещества;	Оценка за контрольную работу №5 (5семестр) Оценка экзамен(5семестр)

	- обрабатывать экспериментальные данные, полученные с помощью физико-химических методов исследования вещества; - использовать современные приборы и методики, проводить и организовывать эксперименты, готовить образцы для проведения измерений Владеет: -способами интерпретации данных, полученных различными физико-химическими методами исследования строения вещества;	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

« _____ »

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

« _____ »

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Супрамолекулярная химия»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена д.х.н., профессором, зав. кафедрой Сколтех В.Ф. Травенем.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтех РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой Сколтеха «*Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии*» РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «*Супрамолекулярная химия*» относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области физики, органической химии, в области химии координационных соединений, химической термодинамики и строения вещества.

Цель дисциплины – приобретение студентами знаний, умений, владений и в формировании компетенций в области материаловедения и, в частности, в области дизайна, создания и исследования новых функциональных материалов.

Задачи дисциплины

- формирование у обучающихся системных углубленных знаний в области науки о реальном строении твердых тел;
- формирование понимания взаимосвязи состава/строения и свойств материала;
- формирование представлений о типах современных материалов и подходах к выбору и дизайну материалов для конкретных задач развития инновационных технологий.

Дисциплина «*Супрамолекулярная химия*» преподается в 6 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6.Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономических и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами
			ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	
			ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для изучения реакционной способности органических и гибридных материалов.	

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные закономерности строения твердых тел на нано-, микро- и макроуровне;
- важнейшие типы современных материалов для генерации, преобразования и сохранения энергии;
- основные способы получения различных типов материалов и их влияние на свойства получаемого материала;
- методы исследования свойств материала и прогнозирования его работоспособности в заданных условиях эксплуатации;

Уметь:

- использовать полученные знания о взаимосвязи состава/структуры материала с его свойствами для решения задач дизайна материалов с заданными свойствами;
- оценивать перспективы использования материала для решения различных задач развития инновационных технологий;
- применять современные научно-технические достижения для решения проблем наук о материалах и смежных наук.

Владеть:

- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области материаловедения;
- методологическими подходами к изучению свойств материалов;
- способностью генерировать новые идеи при решении практических задач в области наук о материалах.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	4	144	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	1,4	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	1,4	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,2	44,4	32,7
Контактная самостоятельная работа (<i>АттК из УП для зач / зач с оц.</i>)	1,2	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины (<i>или другие виды самостоятельной работы</i>)		44	32,4
Вид контроля:			
Экзамен	0,99	35,6	26,7
Контактная работа – промежуточная аттестация	0,99	17,6	13,4
Подготовка к экзамену.		18	13,5
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1. Природа супрамолекулярных взаимодействий	54	16	16	22
1.1	Введение в супрамолекулярную химию	6	2	2	2
1.2	Многообразие супрамолекулярных взаимодействий	6	2	2	2
1.3	Природа π - π -стэкинга	7	2	2	3
1.4	Ион-ионные взаимодействия	7	2	2	3
1.5	Связывание катионов	7	2	2	3
1.6	Связывание анионов	7	2	2	3
1.7	Связывание нейтральных молекул	7	2	2	3
1.8	Темплатны и самосборка	7	2	2	3
2.	Раздел 2. Молекулярные устройства	54	16	16	22
2.1	Определение и философия молекулярных устройств	6	2	2	2
2.2	Супрамолекулярная фотохимия	7	2	2	3
2.3	Фотохимические и электрохимические устройства	7	2	2	3
2.4	Молекулярные электронные устройства	7	2	2	3
2.5	Молекулярные переключатели и выпрямители	7	2	2	3
2.6	Молекулярные машины на основе катенанов и ротаксанов	7	2	2	3
2.7	Фотохимические устройства на основе дендримеров	7	2	2	3
2.8	Перспективы развития супрамолекулярной химии	6	2	2	2
	ИТОГО	108	32	32	44
	Экзамен (если предусмотрен УП)	36			
	ИТОГО	144			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Природа супрамолекулярных взаимодействий.

1.1 Введение в супрамолекулярную химию.

Место дисциплины Супрамолекулярная химия в плеяде естественнонаучных дисциплин. Задачи и методы дисциплины. Системы классификации супрамолекулярных структур, функциональная классификация, структурная классификация. Концепция «структура-свойство», влияние внешних условий. Проблемы выбора и дизайна супрамолекулярных структур для генерации, преобразования и сохранения энергии;

1.2. Многообразие и комплексный характер супрамолекулярных взаимодействий. Преобладающая роль водородных связей среди нековалентных взаимодействий. Свойства водородных связей; энергии, длина и классификация водородных связей Регистрация водородных связей в ИК- и ЯМР-спектрах. Наличие в нейтральных структурах прямой корреляции силы водородной связи с ее длиной, определяемой методом рентгеноструктурного анализа.

Наиболее характерные примеры структур с сильными водородными связями: двойная спираль ДНК, димеры карбоновых кислот. Инженерия кристаллов с водородными связями. Слабые водородные связи. Водородные связи с участием металлов и гидридов металлов.

1.3. Природа π - π -стэкинга.

Электростатическое взаимодействие между ароматическими кольцами, одно из которых имеет избыток электронной плотности, а другое характеризуется ее дефицитом.. Типы π - π -стэкинга: «плоскость к плоскости» (роль такого π - π -стэкинга в стабилизации двойной спирали ДНК и в структуре графита) и «торец к плоскости» (характерен для малых ароматических углеводородов).

Катион- π взаимодействия. Наиболее характерный пример такого взаимодействия – молекула ферроцена, в которой катион железа связан с фрагментом цикlopентадиенила в значительной мере ковалентно.

1.4. Ион-ионные взаимодействия.

Типичный пример такого взаимодействия – ионная решетка хлорида натрия, в которой каждый атом иона натрия окружен шестью ионами хлора.

Ион-дипольные взаимодействия. Пример такого взаимодействия – связывание иона натрия с шестью молекулами воды как в растворе, так и в твердом состоянии. Супермолекулярная аналогия – связывание ионов щелочных металлов с атомами кислорода молекул краун-эфиров.

Диполь-дипольные взаимодействия наблюдаются, например, между карбонильными функциями в кетонах и альдегидах.

Силы Ван-дер-Ваальса возникают благодаря поляризации электронного облака из-за соседства близлежащих ядер. По своей природе это – силы притяжения. Типы сил Ван-дер-Ваальса: дисперсионные силы притяжения (силы Лондона) и обменно-отталкивающие силы. Равновесие указанных сил на малых расстояниях.

Гидрофобные эффекты – результат выталкивания больших или слабосольватированных частиц из полярных растворителей, прежде всего, и Характерный пример - несмешиваемость минерального масла и воды.

1.5 Связывание катионов

Краун-эфиры: номенклатура, синтез, метод высокого разбавления Лариат-эфиры. Поданды: ациклические лиганды, Криптанды: трехмерные краун-эфиры. Сферанды – жесткие трехмерные криптанды. Мягкие лиганды для мягких ионов металлов: гетерокраун-эфиры, гетерокриптанды, смешанные криптанды, основания Шиффа, Связывание органических катионов: связывание катионов аммония корандами, связывание катионов аммония трехмерными лигандами, хиральное распознавание, дифильные рецепторы.

Алкалиды и электриды. Каликсарены: номенклатура, синтез, применение. Углеродные донорные и π -кислотные лиганды. Сидерофоры. Селективность связывания катионов.

Общие положения: соответствие между размерами катиона и полостью лиганда, электростатический заряд, степень предорганизации лиганда, энтальпийный и энтропийный вклады во взаимодействие катион-лиганд; свободные энергии сольватации катиона и хозяина; кинетика катионного связывания. Примеры краун-эфиров, лариат-эфиров, криптанов. Макроциклический, макробикиклический и темплатный эффекты. Роль энтальпийного и энтропийного факторов. Примеры их оценки. Предорганизация и комплементарность: термодинамические эффекты, кинетический и.

1.6 Связывание анионов

Концепция конструирования лигандов для анионов. Сходство в связывании катионов и анионов: предорганизация, комплементарность, условия сольватации. Различия: большие размеры анионов требуют больших размеров лигандов, большее разнообразие форм и размеров анионов, анионы имеют большие значения энергий сольватации, что требует более эффективных лигандов; анионы, как правило, координационно насыщены и могут связываться лигандом лишь сравнительно слабыми силами – водородные связи, силы Ван-дер-Ваальса. Биологические рецепторы для анионов. Нейтральные рецепторы. Металлоорганические рецепторы: совместная «работа» электростатических сил и водородных связей. Влияние макроциклического эффекта на связывание хлорид-ионов. «Гидридная губка». Сопоставление структур «протонной губки» и «гидридной губки». Хелатирующие свойства кислот Льюиса. Анта-крауны. Включение кислот Льюиса в кольцо макроцикла – путь к получению лигандов, очень сильно связывающих анионы.

1.7. Связывание нейтральных молекул

Связывание нейтральных молекул характеризуется отсутствием электростатических взаимодействий и относится к числу слабых. Их комплексообразование обусловлено силами Ван-дер-Ваальса или водородными связями (координационные связи, как правило, также отсутствуют). Связывание нейтральных молекул характеризуется низкими константами связывания. Тем не менее, оно имеет ряд важных применений: разделение смесей близко родственных соединений и энантиомеров, хранение газов и токсичных веществ, медленное выделение лекарств при физиологических условиях,

1.8 Темплатны и самосборка 1

Ограничения традиционного органического синтеза: субъективность принимаемых синтетических решений, низкие суммарные выходы целевых продуктов в многостадийных синтезах.

Принципиальные отличия методов супрамолекулярной химии. Темплатный синтез. Идеологические основы. Иерархия терминов Жан Мари Лена: «темплатирование» (супрамолекулярное содействие синтезу, шаблонирование), «самосборка», «самоорганизация». Темплатирование как способность самопроизвольно и строго определенным (запрограммированным) путем объединяться с образованием ансамблей в одном, двух или трех измерениях и, возможно (хотя и не обязательно), во времени. Кинетический и термодинамический аспекты самосборки

1.9. Темплаты и самосборка 2

Примеры самосборки. Биохимическая самосборка: двойная спираль ДНК (строгая самосборка), вирус табачной мозаики, порфириновые комплексы цинка, Самосборка координационных соединений. Металлические ансамбли. Катенаны и ротаксаны.

Раздел 2. Молекулярные устройства

2.1. Определение и философия молекулярных устройств.

Иерархия устройств и машин: макро-уровень, микро-уровень, нано-уровень (молекулярный уровень). Супрамолекулярное устройство как комплексная система, сконструированная из молекулярных компонентов, обладающих определенными

индивидуальными свойствами. Наиболее характерные компоненты супрамолекулярных устройств – фото-активные (способные поглощать или излучать свет), редокс-активные (способные отдавать или принимать электрон) и рН-активные (реагирующие на изменение рН среды) молекулы,

2.2. Супрамолекулярная фотохимия

Основные концепции и определения фотохимии. Основное и возбужденное состояние молекулы. Безызлучательное рассеяние поглощенной энергии. Фотохимическая реакция. Флуоресценция. Триплетное возбужденное состояние. Фосфоресценция.

Фотохимическая активация – наиболее распространенный способ управления супрамолекулярным устройством: индуцирование и разделение зарядов, индуцирование катализа, управление сенсорными свойствами, изменение состояний бистабильных систем (переключение).

2.3. Фотохимические и электрохимические устройства на основе бипиридила и фенантролина

Бипиридил, фенантролин и их аналоги – эффективные световые антенны, сенсibiliзирующие координированные с ними ионы металлов. Комплексы с ионами металлов, способные находиться в долгоживущих фосфоресцентных возбужденных состояниях.

2.4. Молекулярные электронные устройства 1

Устройства для преобразования света. Флуоресценция донорно-акцепторных (push-pull) систем для преобразования света. Фотоиндуцируемый перенос электрона в нековалентно-связанных системах. Перенос электрона в водородо-связанных системах. Перенос электрона через сигма-каркас.

2.5. Молекулярные электронные устройства 2. Молекулярные провода.

Молекулярные провода. Способность молекулярного провода соединять два компонента (как правило, донор и акцептор) и проводить электрический сигнал или импульс между ними. Трансмембранный ток, необходимый для передачи нервного импульса (в Биохимии). Многожильные молекулярные кабели.

2.6. Молекулярные переключатели и выпрямители

Система 1,2-дитиенилэтена как переключатель. Переключаемый акт – переход 1,2-дитиенилэтена между двумя стабильными формами в зависимости от длины падающего света. Обратимость переключения. Различия в электронных структурах открытой и закрытой форм. Электропереключаемая флуоресценция. Переключаемое связывание.

2.7. Молекулярные машины на основе катенанов и ротаксанов

Управление молекулярной машиной на основе [2]-ротаксана изменением рН. Редокс- и фотопереключаемые ротаксаны. Хромофорные переключатели на примере переключателя на основе 1,5-дигидроксинафталина и 18-краун-6.

2.8. Фотохимические устройства на основе дендримеров

Дендримеры (каскадные молекулы) – монодисперсные макромолекулы с высокоразветвленной трехмерной структурой. Перспективность дендримеров для фармакологии, для создания функциональных материалов и конструирования антенн. Основная проблема химии дендримеров – чистота полимеров высоких генераций. Два главных пути синтеза дендримеров: дивергентный подход и конвергентный подход.

2.9. Перспективы развития супрамолекулярной химии.

Билмиметика. Супрамолекулярная биохимия. Характеристика биологических моделей. Структура и механизмы работы ферментов. Коранды – имитаторы АТФ-аз. Металлобиоцентры. Аналоги гема, Модели витамина B12.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	
	Знать:			
1	– основные закономерности строения твердых тел на нано-, микро- и макроуровне;	+		
2	– важнейшие типы современных материалов для генерации, преобразования и сохранения энергии;	+		
3	– основные способы получения различных типов материалов и их влияние на свойства получаемого материала;		+	
4	– методы исследования свойств материала и прогнозирования его работоспособности в заданных условиях эксплуатации;		+	
	Уметь:			
5	– использовать полученные знания о взаимосвязи состава/структуры материала с его свойствами для решения задач дизайна материалов с заданными свойствами;	+		
6	– оценивать перспективы использования материала для решения различных задач развития инновационных технологий;		+	
7	– применять современные научно-технические достижения для решения проблем наук о материалах и смежных наук.	+	+	
	Владеть:			
8	– способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области материаловедения;	+	+	
9	– методологическими подходами к изучению свойств материалов;	+	+	
	– способностью генерировать новые идеи при решении практических задач в области наук о материалах.	+	+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>				
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК		
10	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических и гибридных соединений с	ПК-6.1. Знает современные экспериментальные методы для проектирования направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	

12	полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.2. Умеет применять полученные знания для осуществления направленного синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами		+
		ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для изучения реакционной способности органических и гибридных материалов.		+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Введение в супрамолекулярную химию	2
2	1	Многообразие супрамолекулярных взаимодействий	2
3	1	Природа π - π -стэкинга	2
4	1	Ион-ионные взаимодействия	2
5	1	Связывание катионов	2
6	1	Связывание анионов	2
7	1	Связывание нейтральных молекул	2
8	1	Темплатны и самосборка	2
9	2	Определение и философия молекулярных устройств	2
10	2	Супрамолекулярная фотохимия	2
11	2	Фотохимические и электрохимические устройства	2
12	2	Молекулярные электронные устройства	2
13	2	Молекулярные переключатели и выпрямители	2
14	2	Молекулярные машины на основе катенанов и ротаксанов	2
15	2	Фотохимические устройства на основе дендримеров	2
16	2	Перспективы развития супрамолекулярной химии	2

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *экзамена* (6 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов), и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

- введение в супрамолекулярную химию
- природа супрамолекулярных взаимодействий
- связывание катионов.
- связывание анионов
- связывание нейтральных молекул.
- темплатны и самосборка .
- молекулярные устройства
- супрамолекулярная фотохимия
- фотохимические и электрохимические устройства на основе бипиридила и фенантролина
- молекулярные электронные устройства: молекулярные провода, молекулярные переключатели и выпрямители
- фотохимические устройства на основе дендримеров
- перспективы развития супрамолекулярной химии

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы составляет 30 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 4 вопроса, 1, 2 и 3 вопросы по 8 баллов за вопрос, 4 вопрос- 6 баллов.

Вопрос 1.

Системы классификации супрамолекулярных структур, функциональная классификация, структурная классификация.

Вопрос 2.

Проблемы выбора и дизайна супрамолекулярных структур для генерации, преобразования и сохранения энергии.

Вопрос 3.

Преобладающая роль водородных связей среди нековалентных взаимодействий

Вопрос 4.

Связывание катионов в полости «хозяина». Краун-эфиры: номенклатура, синтез, метод высокого разбавления Лариат-эфиры. Поданды: ациклические лиганды.

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 4 вопроса, 1, 2 и 3 вопросы по 8 баллов за вопрос, 4 вопрос- 6 баллов.

Вопрос 1.

Управляющие компоненты супрамолекулярных устройств

Вопрос 2.

Фотохимические и электрохимические устройства на основе бипиридила и фенантролина.

Вопрос 3

Молекулярные электронные устройства: провода, переключатели, выпрямители.

Вопрос 4..

Молекулярные машины на основе катенанов

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (6 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1 и 2 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Системы классификации супрамолекулярных структур, функциональная классификация, структурная классификация. Концепция «структура-свойство», влияние внешних условий. Проблемы выбора и дизайна супрамолекулярных структур для генерации, преобразования и сохранения энергии.

2. Многообразие и комплексный характер супрамолекулярных взаимодействий. Преобладающая роль водородных связей среди нековалентных взаимодействий. Другие супрамолекулярные взаимодействия.

3. Связывание катионов. Краун-эфиры: номенклатура, синтез, метод высокого разбавления Лариат-эфиры. Поданды: ациклические лиганды, Криптан-д.ы: трехмерные краун-эфиры. Сферанды – жесткие трехмерные криптан-д.ы.

4. Связывание анионов. Концепция конструирования лигандов для анионов. Сходство и различия в связывании катионов и анионов: предорганизация, комплементарность, условия сольватации

5. Особенности связывания нейтральных молекул

6. Темплаты и самосборка. Идеологические основы темплатного синтеза.

7. Определение и философия молекулярных устройств. Иерархия устройств и машин: макро-уровень, микро-уровень, нано-уровень (молекулярный уровень).

8. Управляющие компоненты супрамолекулярных устройств – фото-активные (способные поглощать или излучать свет), редокс-активные (способные отдавать или принимать электрон) и рН-активные (реагирующие на изменение рН среды) молекулы.

9. Фотохимические и электрохимические устройства на основе бипиридила и фенантролина.

10. Молекулярные электронные устройства: провода.

11. Молекулярные электронные устройства: переключатели

12. Молекулярные электронные устройства: выпрямители.

13. Молекулярные машины на основе катенанов

14. Управление молекулярной машиной на основе [2]-ротаксана изменением рН.

15. Редокс- и фотоперключаемые ротаксаны. Хромофорные переключатели на примере переключателя на основе 1,5-дигидрокси-нафталина и 18-краун-6.

16. Перспективность дендримеров для фармакологии, для создания функциональных материалов и конструирования антенн.

17. Главные пути синтеза дендримеров: дивергентный подход и конвергентный подход.

18. Супрамолекулярная биохимия. Характеристика биологических моделей

19. Биомиметика. Перспективы развития супрамолекулярной химии

Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____/Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
	Супрамолекулярная химия

Билет № 1

1. Многообразие и комплексный характер супрамолекулярных взаимодействий.
2. Управляющие компоненты супрамолекулярных устройств – фото-активные (способные поглощать или излучать свет), редокс-активные (способные отдавать или принимать электрон) и pH-активные (реагирующие на изменение pH среды) молекулы

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Дж.В. Стив, Дж.Л. Эствуд, Супрамолекулярная химия, том 1, Москва, ИКЦ «Академкнига», 2007, 479 с.
2. Дж.В. Стив, Дж.Л. Эствуд, Супрамолекулярная химия, том 2, Москва, ИКЦ «Академкнига», 2007, 440 с

Б. Дополнительная литература

1. Фенелонов В. Б. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2002. — 414 с. (2-е изд., испр. и доп. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. — 442 с.)

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- ACS Nano. ISSN: 1936-0851, 1936-086X
- Computational Materials Science. ISSN: 0927-0256
- Advanced Composite Materials. ISSN: 1568-5519
- Advanced Materials. ISSN: 1521-4095
- Chemistry of Materials. ISSN: 1520-5002
- Crystal Growth & Design. ISSN: 1528-7505
- Journal of Applied Crystallography. ISSN: 1600-5767
- Nature Materials. ISSN: 1476-4660
- Journal of the American Ceramic Society. ISSN: 1551-2916
- European Journal of Glass Science and Technology. Part A. ISSN: [1753-3546](#)

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 10, (общее число слайдов – 230).
- цифровые копии учебных материалов, находящихся в открытом доступе в сети Интернет.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Супрамолекулярная химия*» проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

- Учебная аудитория для проведения лекционных и практических занятий, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью.
- Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с выходом в Интернет и доступом к базам данных.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

1.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Наименование раздела	Знает: — основные закономерности строения твердых тел на нано-, микро- и макроуровне; — важнейшие типы современных материалов для генерации, преобразования и сохранения энергии; Умеет: — использовать полученные знания о взаимосвязи состава/структуры материала с его свойствами для решения задач дизайна материалов с заданными свойствами; — применять современные научно-технические достижения для решения проблем наук о материалах и смежных наук. Владеет: — способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области материаловедения; — методологическими подходами к изучению свойств материалов; — способностью генерировать новые идеи при решении практических задач в области наук о материалах.	Оценка за контрольную работу №1, №2 (6 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (6 семестр)
Раздел 2. Наименование раздела	Знает: — основные способы получения различных типов материалов и их влияние на свойства получаемого материала; — методы исследования свойств материала и прогнозирования его работоспособности в заданных условиях эксплуатации;	Оценка за контрольную работу №3 (6 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (6 семестр)

	Умеет: — оценивать перспективы использования материала для решения различных задач развития инновационных технологий; — применять современные научно-технические достижения для решения проблем наук о материалах и смежных наук. Владеет: — способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области материаловедения; — методологическими подходами к изучению свойств материалов; — способностью генерировать новые идеи при решении практических задач в области наук о материалах.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Теоретическая неорганическая химия»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена д.х.н., профессором кафедры общей и неорганической химии
Кузнецовым В.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И.
Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Теоретическая неорганическая химия»** относится к обязательной части части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области школьных курсов химии, физики и математики.

Цель дисциплины – овладение бакалаврами систематическими знаниями по теоретической неорганической химии, строению ионных, ковалентных и координационных соединений.

Задачи дисциплины

- освоение теоретических представлений об электронном строении атомов и молекул;
- освоение современными методами описания ковалентной связи в двухатомных и многоатомных соединениях, получение навыка использования симметричных представлений для описания химической связи;
- изучение теорий электронного строения координационных соединений;
- получение представления о взаимосвязи между электронным строением неорганических соединений и их свойствами, что может быть применено для прогнозирования материалов, использующихся для генерации, преобразования и хранения энергии.

Дисциплина **«Теоретическая неорганическая химия»** преподается в 1 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;

Безопасность жизнедеятельности	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций помощь, описывает способы участия в восстановительных мероприятиях

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные понятия теории строения атома;
- основные типа химической связи;
- модельные представления ионной связи;
- основы теории молекулярных орбиталей, в том числе и с привлечением элементов молекулярной симметрии;
- современные подходы к описанию химической связи в координационных и металлоорганических соединениях.

Уметь:

- применять полученные знания для написания электронных формул атомов, ионов и молекул, устанавливать взаимосвязь между строением и химическими свойствами;
- составлять диаграммы молекулярных орбиталей с привлечением представлений молекулярной симметрии;
- описать природу химической связи в координационных и металлоорганических соединениях с использованием теории кристаллического поля и теории молекулярных орбиталей.

Владеть:

- элементарными навыками решения практических задач, связанных с установлением электронного строения неорганических соединений.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3,6	128	96
Лекции	1,8	64	48
Практические занятия (ПЗ)	1,8	64	48
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,4	52	39
Контактная самостоятельная работа	1,4	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		52	39
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лек- ции	Прак. зан.	Сам. рабо- та
1.	Раздел 1. Строение атома и периодический закон	33	12	12	9
1.1	Квантово-механическая модель атома. Электронные орбитали в водородоподобном атоме.	11	4	4	3
1.2	Многоэлектронные атомы. Эффективный ядерный заряд. Электронные термы атомов.	11	4	4	3
1.3	Периодический закон. Периодичность изменения свойств: потенциал ионизации, сродства к электрону, электроотрицательности, радиусов атомов и ионов. Основные атомные характеристики	11	4	4	3
2.	Раздел 2. Ионная связь	41	16	16	9
2.1	Элементарная ячейка и описание кристаллической структуры. Плотнейшие шаровые упаковки. Пустоты в шаровых упаковках.	11	4	4	3
2.2	Основные структурные типы неорганических соединений. Структура металлов. Политипия и полиморфизм. Структуры, не являющиеся плотнейшими упаковками.	15	6	6	3
2.3	Энтальпия ионной связи. Ионные соединения. Основные структурные типы ионных соединений. Цикл Борна-Габера. Уравнения Борна-Ланде, Борна-Майера, Капустинского.	15	6	6	3
3.	Раздел 3. Ковалентная связь	53	18	18	17
3.1	Составление молекулярных орбиталей для двухядерных и многоядерных молекул. Теория валентных связей. Основные положения. σ , π и δ -связи. Делокализованные π -связи, метод резонанса. Предсказание геометрии молекул методом Гиллеспи (ОЭПВО).	23	8	8	7

3.2	Определение геометрии молекул и их дипольного момента. Метод молекулярных орбиталей. Гомоядерные и гетероядерные двухатомные молекулы в рамках теории молекулярных орбиталей. Симметрия молекул. Элементы симметрии. Точечные группы симметрии молекул. Таблицы характеров. Групповые симметризованные орбитали. Построение молекулярных орбиталей многоатомных молекул. Симметрия молекулярных колебаний. Моды колебаний, анализ симметрии.	30	10	10	10
4.	Раздел 4. Химическая связь в координационных соединениях	53	18	18	17
4.1	Теория кристаллического поля. Состав и строение координационных соединений. Типичные лиганды и номенклатура. Изомерия и хиральность.	23	8	8	7
4.2	Теория молекулярных орбиталей для координационных соединений. Основы металлоорганической химии. π-комплексы металлов. Металлоцены. Правило 18 электронов. Полиядерные координационные соединения. Кластеры. Правила Уэйда.	30	10	10	10
	ИТОГО	216	64	64	52

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение. Современные теории химического строения

Раздел 1. Строение атома и периодический закон

1.1. Квантование. Волновые свойства материальных частиц. Стационарное уравнение Шредингера. Решение уравнения Шредингера для водородоподобных атомов. Квантовые числа. Атомные орбитали. Орбитальный и спиновый магнитные моменты электрона. Представление о спин-орбитальном взаимодействии.

1.2. Многоэлектронные атомы. Межэлектронные взаимодействия, теория самосогласованного поля. Экранирование, проникновение, эффективный заряд ядра атома. Расчет константы экранирования по Слейтеру. Принципы построения электронных конфигураций атомов в основном энергетическом состоянии. Принцип наименьшей энергии, принцип Паули и правила Хунда. Энергетический ряд орбиталей многоэлектронного атома. Периодический закон Д.И. Менделеева. Понятие об электронных термах многоэлектронных атомов и ионов.

1.3 Периодический закон. Периодичность изменения свойств: потенциал ионизации, сродства к электрону, электроотрицательности, радиусов атомов и ионов. Первый потенциал ионизации атомов и сродство к электрону. Закономерности изменения потенциала ионизации и сродства к электрону по Периодической системе. Электроотрицательность. Шкалы электроотрицательности: по Малликену, Полингу, Олреду-Рохову. Закономерности изменения электроотрицательности атомов. Атомные и ионные радиусы, условность этих величин, экспериментальные методы определения.

Закономерности изменения атомных и ионных радиусов. Схема Косселя, правило Полинга.

Раздел 2. Ионная связь

2.1. Элементарная ячейка и описание кристаллической структуры твердых тел. Расчет числа атомов в элементарной ячейке. Плотнейшие шаровые упаковки, координационные числа атомов. Типы пустот в плотнейших шаровых упаковках и их размеры.

2.2. Основные структурные типы неорганических соединений. Основные кристаллические структуры металлов. Политопия. Структуры, не являющиеся плотнейшими упаковками. Полиморфизм.

2.3. Энтальпия ионной связи. Ионные соединения. Понятие о структурном типе неорганического соединения. Структурные типы NaCl, CsCl, флюорита, антифлюорита, сфалерита, вюрцита, арсенида никеля, рутила, перовскита, шпинели. Энтальпия ионного кристалла. Уравнения Борна-Ланде, Борна-Майера, Капустинского. Термохимический цикл Борна-Габера.

Раздел 3. Ковалентная связь

3.1. Ковалентная связь. Основные характеристики ковалентной связи. Теория валентных связей. Структуры Льюиса. Типы химических связей (σ , π , δ). Делокализованные π -связи и теория электронного резонанса. Предсказание структуры молекул методом Гиллеспи (отталкивания электронных пар валентной оболочки, ОЭПВО).

Основы метода молекулярных орбиталей. Метод МО ЛКАО. Связывающие, разрыхляющие и несвязывающие орбитали. Электронное строение двухатомных гомоядерных и гетероядерных молекул.

3.2. Симметрия молекул. Элементы симметрии. Точечные группы симметрии по Шенфлису. Матричное представление элементов симметрии. Приводимые и неприводимые представления. Таблицы характеров. Классификация атомных орбиталей по симметрии.

Принципы составления групповых симметризованных орбиталей. Молекулярные орбитали многоатомных молекул. Заполнение молекулярных орбиталей. Электронодефицитные и электроноизбыточные соединения. Понятие о многоцентровых молекулярных орбиталях.

Симметрия молекулярных колебаний. Валентные и деформационные колебания. Определение типа колебаний частицы по симметричным представлениям.

Раздел 4. Химическая связь в координационных соединениях

4.1. Теория кристаллического поля. Координационные соединения. Комплексообразователи и лиганды. Координационное число, основные типы координационных полиэдров. Дентатность и топичность лигандов. Номенклатура и изомерия координационных соединений. Хиральность.

4.2. Теория молекулярных орбиталей. Расщепление атомных орбиталей комплексообразователя в кристаллических полях различной симметрии. Высоко- и низкоспиновое состояния комплексообразователя. Эффект Яна-Теллера. Спектрохимический ряд лигандов. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Электронные и магнитные свойства координационных соединений в свете теории кристаллического поля.

Теория молекулярных орбиталей в координационной химии. Составление групповых орбиталей лигандов в соответствии с представлениями молекулярной симметрии. Схема молекулярных орбиталей октаэдрических комплексов переходных и непереходных элементов в σ -приближении. π -связи в координационных соединениях.

Основы металлоорганической химии. π -комплексы металлов. Металлоцены. Электронное строение металлоценов, правило 18 электронов. Ферроцен, кобальтацен и никелоцен.

Полиядерные координационные соединения. Кластерные и каркасные соединения. Правила Уэйда.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	- основные понятия теории строения атома;	+			
2	- основные типы химической связи;		+		
3	- модельные представления ионной связи;			+	
4	- основы теории молекулярных орбиталей, в том числе и с привлечением элементов молекулярной симметрии;			+	
5	- современные подходы к описанию химической связи в координационных и металлоорганических соединениях.				+
	Уметь:				
6	- применять полученные знания для написания электронных формул атомов, ионов и молекул, устанавливать взаимосвязь между строением и химическими свойствами;	+			
7	- составлять диаграммы молекулярных орбиталей с привлечением представлений молекулярной симметрии;		+	+	+
8	- описать природу химической связи в координационных и металлоорганических соединениях с использованием теории кристаллического поля и теории молекулярных орбиталей.			+	+
	Владеть:				
9	- элементарными навыками решения практических задач, связанных с установлением электронного строения неорганических соединений.	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>универсальные и общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>					
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК			

10	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;	+	+	+	+
11	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций помощь, описывает способы участия в восстановительных мероприятиях	+	+	+	+
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК				
12	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	+	+	+	+
13	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Уравнение Шредингера для водородоподобных атомов. Радиальная и угловая волновые функции. Радиальная функция распределения. Расчет энергетических уровней водородоподобного атома	2
2	1	Многоэлектронные атомы. Принципы составления электронных конфигураций атомов и ионов.	2
3	1	Эффективный заряд атома. Экранирование. Расчет константы экранирования по Слейтеру.	2
4	1	Периодический закон Д.И. Менделеева. Периодическая таблица как графическая форма представления периодического закона. Вторичная периодичность. Релятивистские поправки и размывание периодичности у тяжелых элементов.	2
5	1	Первый потенциал ионизации и сродство к электрону многоэлектронных атомов. Электроотрицательность. Шкалы электроотрицательности.	2
6	1	Атомные и ионные радиусы. Закономерности изменения атомных и ионных радиусов. Схема Косселя. Правило Полинга.	2
7	2	Элементарная ячейка кристаллического соединения. Расчет числа атомов в элементарной ячейке. Плотнейшие шаровые упаковки.	2
8	2	Основные структурные типы неорганических соединений. Координационные числа катионов и анионов.	2
9	2	Энтальпия кристаллической решетки. Уравнения Борна-Ланде, Борна-Майера, Капустинского. Цикл Борна-Габера. Решение задач	2
10	2	Подготовка к контрольной работе № 1	2
11	2,3	Контрольная работа № 1 (1 час). Основные характеристики ковалентной связи: длина, валентные углы.	2
12	3	Теория валентных связей. σ , π и δ -связи. Делокализованные π -связи. Метод электронного резонанса.	2
13	3	Метод ОЭПВО (Гиллеспи). Определение структуры молекул. Достоинства и недостатки метода ОЭПВО.	2
14	3	Метод молекулярных орбиталей. Представление о системе уравнений Хартри-Фока-Рутана. Метод МО ЛКАО. Связывающие и разрыхляющие орбитали	2
15	3	Электронное строение двухатомных молекул в рамках теории молекулярных орбиталей.	2

		Составление электронных формул молекул и ионов, определение кратности связи.	
16	3	Молекулярная симметрия. Определение точечной группы симметрии частицы. Матричное представление элементов симметрии. Таблицы характеров.	2
17	3	Составление молекулярных орбиталей простейших неорганических молекул (H_2O , NH_3 , CH_4).	2
18	3	Составление молекулярных орбиталей молекул с π -связями (CO_2 , бензол).	2
19	3	Электронодефицитные и электроноизбыточные молекулы. Многоцентровые химические связи	2
20	3	Симметрия молекулярных колебаний. Теоретико-групповое описание молекулярных колебаний.	2
21	3	Подготовка к контрольной работе № 2	2
22	3,4	Контрольная работа № 2 (1 час). Координационные соединения. Основные типы координационных полиэдров.	2
23	4	Номенклатура и изомерия координационных соединений.	2
24	4	Теория кристаллического поля. Октаэдрическое и тетраэдрическое расщепления. Расчет ЭСКП.	2
25	4	Искажение симметричных конфигураций. Эффект Яна-Теллера.	2
26	4	Теория молекулярных орбиталей координационных соединений. Составление групповых орбиталей лигандов. Энергетические схемы октаэдрического комплекса в σ - и π -приближении.	2
27	4	Основы металлоорганической химии. π -комплексы металлов. Металлоцены. Электронное строение ферроцена. Правило 18 электронов.	2
28	4	Химические свойства металлоценов в свете их электронного строения.	2
29	4	Полиядерные комплексы металлов. Кластерные и каркасные соединения. Химическая связь в $\text{Re}_2\text{Cl}_8^{2-}$.	2
30	4	Кластерные соединения. Правила Уэйда. Расчет «магического» числа электронов.	2
31	4	Подготовка к контрольной работе № 3	2
32	4	Контрольная работа № 3. Подведение итогов семестра.	2

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине «*Теоретическая неорганическая химия*» не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает: ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с

электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;

- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *экзамена* (1 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов), и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

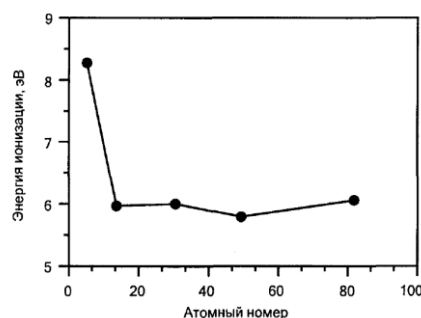
Реферативно-аналитическая работа не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы составляет 20 баллов за каждую.

Разделы 1,2 Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 7 вопросов, задания 1,4 оцениваются в 3 балла, задания 2,3 – по 4 балла, задания 5,6,7 – по 2 балла.

1. Первые потенциалы ионизации атомов серебра и рубидия равны соответственно 7,57 эВ и 4,18 эВ. Рассчитайте константу экранирования внешнего 5s-электрона и объясните наблюдаемую разницу значений.
2. Ионные соединения MgO, LiF и NaCl имеют одинаковую кристаллическую решетку типа каменной соли. Пользуясь модельными представлениями об энергии кристаллической решетки ионных соединений, расположите эти соединения в порядке возрастания энтальпии кристаллической решетки.
3. На графике приведена зависимость первого потенциала ионизации элементов 13 группы от порядкового номера элемента. Объясните немонотонность наблюдаемой зависимости. Будет ли такое явление наблюдаться для щелочных металлов? Ответ обоснуйте.



- Схематически нарисуйте изображения $3p_z$ и $3d_{x^2-y^2}$ орбиталей. Укажите знаки волновой функций, четность или нечетность орбиталей. Укажите узловые поверхности для данных орбиталей.
- Схематически изобразите радиальную волновую функцию и функцию радиального распределения вероятности для $3s$ -орбитали в водородоподобном атоме.
- Напишите электронные термы для следующих частиц в основном состоянии: Fe^{2+} , V^{3+} , Cl^- .
- К какому структурному типу относится кристаллическая решетка CaF_2 ? Чему равны координационные числа катиона и аниона?

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 3 вопроса, задание 1 оценивается по 8 баллов, задания 2,3 – по 6 баллов.

- Привести резонансные структуры для следующих частиц: SO_4^{2-} , HN_3 , SO_3 (без учета вклада d -подуровня).
- Пользуясь методом ОЭПВО определить геометрию следующих частиц: ICl_4^- , SF_4 , ClO_3^- , XeF_6 . Дать необходимые пояснения.
- Построить энергетическую схему молекулярных орбиталей (определить точечную группу симметрии, выписать характеры представлений, привести к неприводимому виду) для следующих частиц CH_3^- , SO_2 , CO_2 . Сформулировать на основании построенной диаграммы магнитные и химические свойства частиц.

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 4 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

- Сколько существует изомеров для комплексов $[\text{Ni}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2]$ и $[\text{Pt}(\text{PPh}_3)_2\text{Cl}_2]$, если известно, что их магнитные свойства различны?
- Постройте диаграмму молекулярных орбиталей для $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$.
- Объясните закономерности в изменении величины pK_a следующих карбонилгидридов: $\text{HV}(\text{CO})_6$ 0,5, $\text{H}[\text{Mn}(\text{CO})_5]$ 7,1, $\text{H}_2[\text{Fe}(\text{CO})_4]$ 4,0 (pK_{a1}).
- Напишите уравнения реакций никелоцена с NO , $\text{Ni}(\text{CO})_4$, Na/EtOH , $\text{Me}-\text{CH}=\text{CH}(\text{Me})\text{MgBr}$.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины и содержит 4 вопроса, максимальное количество баллов за каждый из вопросов – 10 баллов..

- Строение электронных оболочек атома. Угловая и радиальная составляющая атомной волновой функции. Радиальная функция распределения.

2. Многоэлектронные атомы. Эффективный заряд ядра атома. Расчет константы экранирования.
3. Энергии ионизации и сродства к электрону атома или одноатомного иона. Электроотрицательность.
4. Энергия ионной кристаллической решетки. Взаимосвязь природы ионов и свойств кристаллов. Основные структурные типы неорганических соединений.
5. Обсудите все известные вам тенденции в изменении ионных радиусов, приведите примеры таких изменений.
6. Ионная связь. Строение ионных соединений в твердой фазе и в растворе.
7. Различные методы описания ковалентной связи.
8. Устойчивость молекулы согласно методу молекулярных орбиталей. Сравнение предельных типов химической связи (ковалентная неполярная и ионная).
9. Диаграммы МО гомоатомных и гетероатомных двухатомных молекул (молекулярных ионов) для описания химических и магнитных свойств. Дипольный момент молекулы.
10. Симметрия молекул. Элементы и операции симметрии. Символика Шёнфлиса.
11. Точечные группы симметрии. Представление группы.
12. Неприводимые представления и характер представления. Формула приведения.
13. Диаграммы МО многоатомных молекул для описания химических и магнитных свойств. Потенциал ионизации молекулы.
14. Диаграммы МО для водородных соединений 13ой – 16ой групп.
15. Диаграммы МО для оксидов 14ой – 16ой групп.
16. Диаграммы МО для галогенидов 2ой, 13ой – 14ой групп.
17. Диаграммы МО для галогенидов 15ой – 18ой групп.
18. Сколько первых потенциалов ионизации и почему имеют молекулы NO O₂ B₂ H₂O SF₆.
19. Особенности химического поведения орбитальнодефицитных соединений, их связь с электронным строением. Диаграммы МО для электроноизбыточных соединений.
20. Особенности химического поведения электронодефицитных соединений, их связь с электронным строением. Диаграммы МО для электронодефицитных соединений.
21. Природа связи металл-лиганд в соединениях переходных металлов. Основные положения теории кристаллического поля.
22. Симметрия расщеплений *d*-орбиталей. Энергия стабилизации кристаллическим полем.
23. Сильное и слабое кристаллическое поле. Магнитные и спектральные свойства комплексных соединений переходных металлов.
24. Эффект Яна-Теллера.
25. Спектрохимический ряд лигандов с позиций метода молекулярных орбиталей.
26. Применение теории поля лигандов для описания химической связи в координационных соединениях переходных металлов.
27. Электронное строение (с позиций ММО) галогенидных комплексов 6ой и 10ой групп.
28. Электронное строение (с позиций ММО) цианидных комплексов 8ой и 10ой групп.
29. Электронное строение (с позиций ММО) карбонильных комплексов 6ой и 10ой групп.
30. Карбонильные комплексы переходных металлов. Геометрия и электронное строение.
31. Особенности электронного и геометрического строения олефиновых комплексов, по сравнению с карбонильными. Модель Дьюара-Чатта-Дункансона.
32. Концепция изолобальной аналогии. Изолобальные ряды.

33. Сэндвичевые соединения переходных металлов с параллельными циклами (гомолигандные, гетеролигандные, многопалубные). Геометрия, электронное строение, магнитные свойства.
34. Электронное строение (с позиций ММО) бисциклопентадиенильных комплексов переходных металлов.
35. Электронное строение (с позиций ММО) бисареновых комплексов переходных металлов.
36. Полиядерные комплексы металлов. Кластерные соединения. Правила Уэйда.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (1 семестр).

Экзамен по дисциплине «*Теоретическая неорганическая химия*» проводится в 1 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 4 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **Экзамена**:

«Утверждаю» (Должность, наименование кафедры) _____ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии»
	Код и наименование направления подготовки 04.03.01 Химия
	Профиль- Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии
Билет № 1 1. Многоэлектронные атомы. Эффективный заряд ядра атома. Экранирование. Рассчитайте константу экранирования для 4s и 3d- электрона атома марганца. (10 баллов). 2. Структурные типы сфалерита и вюрцита. Координационные числа атомов. Пользуясь константами Маделунга, предкажите, какая из полиморфных модификаций ZnS более устойчива? (10 баллов). 3. Составление молекулярных орбиталей на примере молекулы NH₃: матричные представления элементов симметрии в базисе атомов, составление групповых орбиталей H1s и молекулярных орбиталей. Симметрия орбиталей (10 баллов). 4. Напишите уравнения следующих химических превращений (10 баллов):	
$ \begin{array}{ccccccc} \text{Re}_2\text{O}_7 & \xrightarrow{\text{CO(изб)}} & \text{A} & \xrightarrow{2\text{Na}} & \text{B} & \xrightarrow{\text{Br}_2} & \text{C} \xrightarrow{\text{Na[Co(CO)}_4\text{]}} & \text{D} \\ & & & & \swarrow \text{H}_2\text{O} & \searrow 2\text{Na} & & \\ & & & & \text{E} & & \text{F} & \end{array} $	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Шрайвер Д., Эткинс Д. Неорганическая химия. В 2-х т./ пер. с англ. – М.: Мир, 2004. – 679 с.
2. А.В. Шевельков, А.А. Дроздов, М.Е. Тамм / под ред. А.В. Шевелькова. Неорганическая химия. М.: Лаборатория знаний. 2021 – 386 с.

Б. Дополнительная литература

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. 2-е издание. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 496 с.
2. Харгиттаи И., Харгиттаи М Симметрия глазами химика. – М.: Мир., 496 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- .

Научно-технические журналы:

- Журнал Polyhedron ISSN 0277-5387
- Журнал «Журнал неорганической химии» ISSN 0044-457X

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Теоретическая неорганическая химия*» проводятся в форме лекционных, семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Аудитория с доской, компьютером, проектором и экраном.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проектор; экран; аудитория со стационарным комплексом отображения информации с электронного носителя; сканер; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Наименование раздела	<i>Знает:</i> - основные понятия теории строения атома; <i>Умеет:</i> - применять полученные знания для написания электронных формул атомов, ионов и молекул, устанавливать взаимосвязь между строением и химическими свойствами; <i>Владеет:</i> - элементарными навыками решения практических задач, связанных с установлением электронного строения неорганических соединений.	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 2. Наименование раздела	<i>Знает:</i> - основные типа химической связи; <i>Умеет:</i> - составлять диаграммы молекулярных орбиталей с привлечением представлений молекулярной симметрии; <i>Владеет:</i> - элементарными навыками решения практических задач, связанных с установлением электронного строения	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 3. Наименование раздела	<i>Знает:</i> - модельные представления ионной связи; - основы теории молекулярных орбиталей, в том числе и с привлечением элементов молекулярной симметрии; <i>Умеет:</i> - составлять диаграммы молекулярных орбиталей с привлечением представлений молекулярной симметрии; - описать природу химической связи в координационных и металлорганических соединениях с использованием теории кристаллического поля и теории молекулярных орбиталей.	Оценка за контрольную работу №2 (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)

	<i>Владеет:</i> - элементарными навыками решения практических задач, связанных с установлением электронного строения	
Раздел 4. Наименование раздела	<i>Знает:</i> - современные подходы к описанию химической связи в координационных и металлоорганических соединениях. <i>Умеет:</i> - составлять диаграммы молекулярных орбиталей с привлечением представлений молекулярной симметрии; - описать природу химической связи в координационных и металлорганических соединениях с использованием теории кристаллического поля и теории молекулярных орбиталей. <i>Владеет:</i> - элементарными навыками решения практических задач, связанных с установлением электронного строения	Оценка за контрольную работу №3 (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «___»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Теоретические основы химии. Введение в физическую химию»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

«____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена профессором кафедры Сколтеха д.х.н. Кузнецовым В.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Теоретические основы химии. Введение в физическую химию»** относится к Обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся должны знать основной теоретический материал, изучаемый в школьном курсе химии, а также уметь решать простейшие задачи и составлять формулы соединений и уравнения химических реакций. Опираясь на полученные в средней школе знания, программы дисциплин предусматривает дальнейшее углубление знаний в области общей и неорганической химии.

Цель дисциплины – приобретение знаний и компетенций, формирование современных представлений в области теоретических основ химии.

Задачи дисциплины

- овладение теоретическими основами химии и основами неорганической химии;
- формирование у студентов навыков экспериментальной работы;
- развитие навыков решения конкретных практических задач и исследовательской работы.

Дисциплина **«Теоретические основы химии. Введение в физическую химию»** преподается в 1 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей; профессионального развития

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- электронное строение атомов и молекул;
- основы теории химической связи в соединениях разных типов, строение вещества в конденсированном состоянии;
- основные закономерности протекания химических процессов и характеристики равновесного состояния;
- методы описания химических равновесий в растворах электролитов,
- строение и свойства координационных соединений;

Уметь:

- выполнять основные химические операции, определять термодинамические характеристики химических реакций и равновесные концентрации веществ;
- использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач;
- прогнозировать влияние различных факторов на равновесие в химических реакциях;

Владеть:

- теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов;
- экспериментальными методами определения некоторых физико-химических свойств неорганических соединений.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	8	288	216
Контактная работа – аудиторные занятия:	5,4	192	143
Лекции	1,8	64	47,6
Практические занятия (ПЗ)	1,8	64	47,6
Лабораторные работы (ЛР)	1,8	64	47,6
Самостоятельная работа	1,6	60	46
Контактная самостоятельная работа	1,6	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины <i>(или другие виды самостоятельной работы)</i>		60	46
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекц ии	Прак . зан.	Лаб. работ ы	Сам. работ а
1	Химический эквивалент. Закон эквивалентов.	16	4	4	-	4
2	Элементы химической термодинамики.	34	12	12	-	10
3	Химическое равновесие	34	12	12	-	10
4	Растворы. Равновесия в растворах.	98	14	14	56	14
5	Элементы химической кинетики	34	12	12	-	10
6	Окислительно-восстановительные процессы и электрохимические процессы	40	10	10	8	12
	ИТОГО	252	64	64	64	60
	Экзамен	36				
	ИТОГО	288				

4.2 Содержание разделов дисциплины

1.1 Вычисления с использованием закона эквивалентов. Понятие о химическом эквиваленте и факторе эквивалентности в обменных и окислительно-восстановительных реакциях. Закон эквивалентов. Расчёты с использованием закона эквивалентов.

1.2. Элементы химической термодинамики. Термодинамическая система. Классификация термодинамических систем. Термодинамические функции состояния (характеристические функции). Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы. Внутренняя энергия и энтальпия, их физический смысл. Экзо- и эндотермические реакции. Термохимия и термохимические уравнения. Масштаб тепловых эффектов различных процессов. Понятие о стандартном состоянии веществ, находящихся в конденсированной (жидкой или твёрдой) фазе, газов, растворов, слабых (ассоциированных) электролитов, комплексных ионов.

Стандартные энтальпии образования, сгорания и растворения веществ, образующих сильные электролиты в растворе.

Основной закон термохимии – закон Гесса и его следствия. Использование закона Гесса для вычисления тепловых эффектов различных процессов и энтальпий связи в молекуле.

Химически обратимые и необратимые процессы. Термодинамически обратимые равновесные процессы. Понятие об энтропии (работы Клаузиуса). Изменение энтропии в обратимых и необратимых процессах в изолированной системе. Критерий самопроизвольно протекающего процесса в изолированной системе.

Статистический смысл энтропии. Формула Больцмана. Энтропия как мера неупорядоченности системы. Зависимость энтропии от температуры. III закон термодинамики. Энтропия и природа вещества. Изменение энтропии в различных процессах.

Энергия Гиббса, её физический смысл и связь с энтальпией и энтропией. Изменение энергии Гиббса как мера химического сродства. Критерий самопроизвольного протекания процессов в изобарно-изотермических условиях.

Стандартные энергии Гиббса образования и сгорания веществ. Вычисление величин ΔG° различных процессов. Энтальпийный и энтропийный факторы процесса.

1.3. Химическое равновесие

Истинное и кажущееся химические равновесия, их признаки. Равновесие в гомогенных и гетерогенных системах.

Константы химического равновесия K_c и K_p для газовых равновесий, взаимосвязь между ними.

Принцип смещения равновесия Ле-Шателье-Брауна. Влияние различных факторов на смещение равновесия.

Взаимосвязь величины ΔG° процесса с константой химического равновесия. Вычисление равновесного выхода продукта реакции. Использование данных о температурной зависимости константы химического равновесия в термодинамических расчётах.

1.4. Растворы. Равновесия в растворах

Способы выражения состава растворов. Процессы, сопровождающие образование жидких истинных растворов электролитов и неэлектролитов. Сольватация в растворах. Идеальные растворы.

Гомогенные равновесия в растворах электролитов. Ассоциированные и неассоциированные электролиты. Ионная сила растворов неассоциированных электролитов. Понятие о коэффициенте активности и активности как мере отклонения свойств компонента в реальном растворе от его свойств в идеальном растворе. Вычисление коэффициентов активности ионов и средне-ионных коэффициентов активности солей в разбавленных растворах неассоциированных электролитов.

Равновесия в растворах ассоциированных электролитов. Степень и константа электролитической диссоциации. Закон разбавления Оствальда.

Равновесие диссоциации воды. Ионное произведение воды и зависимость K_w от температуры. Водородный и гидроксильный показатели. Шкала величин pH и pOH. Вычисление pH разбавленных растворов неассоциированных кислот и оснований с учётом и без учёта ионной силы раствора, а также pH растворов ассоциированных электролитов.

Равновесия в растворах слабых многоосновных кислот. Расчёт концентраций ионов в этих растворах, а также в растворах многоосновных кислот при заданном значении pH.

Влияние одноименных ионов на равновесие диссоциации слабого электролита. Буферные системы. Вычисление pH буферных растворов. Понятие о буферной ёмкости.

Состояние бесконечного разбавления раствора электролита. Шкала стандартных термодинамических функций образования ионов в водных растворах. Вычисление константы диссоциации ассоциированных электролитов и константы устойчивости комплексных ионов по справочным термодинамическим данным.

Ступенчатая диссоциация электролитов. Альтернативные продукты реакций в растворах электролитов.

Общие сведения о комплексных соединениях. Классификация комплексных соединений. Правила составления их названий. Диссоциация комплексных соединений. Константа устойчивости и нестойкости комплексного иона. Реакции образования и разрушения комплексных соединений.

Гетерогенное равновесие в системе, состоящей из насыщенного раствора малорастворимого сильного электролита и его кристаллов. Понятие о произведении растворимости (ПР). Вычисление растворимости солей с использованием величин ПР и активностей ионов. Условия растворения и осаждения малорастворимого электролита. Влияние присутствия других ионов в растворе на растворимость малорастворимого электролита. Влияние pH на растворимость малорастворимых электролитов.

Поляризующее действие ионов солей на молекулы воды. Гидролиз солей. Гидролиз катиона и аниона. Ступенчатый гидролиз. Типы гидролиза солей: гидролиз неполный обратимый, гидролиз неполный необратимый, полный (обратимый и необратимый).

Количественные характеристики гидролиза – степень и константа гидролиза. Взаимосвязь между ними и концентрацией раствора. Способы усиления и подавления гидролиза. Равновесия в растворах солей, образованных однозарядными и многозарядными катионами и анионами сильных и слабых кислот и оснований. Расчёт pH водных растворов перечисленных выше солей. Взаимодействие растворов двух солей, взаимно усиливающих гидролиз друг друга. Смещение равновесия гидролиза.

Теории кислот и оснований. Недостаточность теории Аррениуса. Теория сольвосистем. Протонная теория кислот и оснований. Константы автопротолиза растворителя. Дифференцирующие и нивелирующие растворители. Электронная теория кислот и оснований.

1.5. Элементы химической кинетики

Основные понятия химической кинетики. Средняя скорость и скорость реакции в данный момент времени. Кинетическое уравнение. Закон действующих масс. Константа

скорости реакции. Порядок и молекулярность реакции. Зависимость скорости реакции от температуры. Понятие об энергии активации. Уравнение Аррениуса. Гомогенный и гетерогенный катализ. Примеры каталитических процессов. Влияние катализатора на энергию активации.

1.6. Окислительно-восстановительные реакции и электрохимические процессы

Понятие о степени окисления элемента в соединениях. Важнейшие окислители и восстановители. Основные схемы превращения веществ в окислительно-восстановительных процессах. Составление уравнений окислительно-восстановительных реакций – метод электронного баланса и метод электронно-ионных уравнений. Влияние различных факторов на направление и глубину окислительно-восстановительных процессов. Окислительно-восстановительные потенциалы и определение направления окислительно-восстановительных реакций. Стандартные электродные потенциалы. Уравнение Нернста. Расчёт констант равновесия окислительно-восстановительных процессов из электрохимических данных. Схемы Латимера

Основные типы химических источников тока, их устройство и принципы работы.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел					
		1	2	3	4	5	6
	Знать:						
1	– электронное строение атомов и молекул	+					
2	– основы теории химической связи в соединениях разных типов, строение вещества в конденсированном состоянии		+				
3	– основные закономерности протекания химических процессов и характеристики равновесного состояния			+			
4	– методы описания химических равновесий в растворах электролитов				+		
5	– строение и свойства координационных соединений					+	+
	Уметь:						
6	– выполнять основные химические операции, определять термодинамические характеристики химических реакций и равновесные концентрации веществ	+					
7	– использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач		+	+	+		
8	– прогнозировать влияние различных факторов на равновесие в химических реакциях					+	+
	Владеть:						
9	– теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов	+	+	+	+	+	+
10	– экспериментальными методами определения физико-химических свойств неорганических соединений	+	+	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Универсальные и общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>							
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК					

7	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей; профессионального развития	+	+	+	+	+	+
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК						
8	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	+	+	+	+	+	+
9	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик					+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1.	1	Практическое занятие 1. Химический эквивалент и фактор эквивалентности. Молярная масса и молярный объём эквивалента вещества. Закон эквивалентов.	2 акад.ч.
2.	1	Практическое занятие 2. Способы выражения состава растворов. Взаимные пересчеты концентраций. Молярная концентрация эквивалента вещества в растворе.	2 акад.ч.
3.	2	Практическое занятие 3. Понятие об энтальпии и её изменении в химических процессах. Тепловые эффекты химических реакций. Стандартные энтальпии образования и сгорания веществ. Использование закона Гесса для вычисления тепловых эффектов различных процессов.	2 акад.ч.
4.	3	Практическое занятие 4. Понятие об энтропии. Абсолютная энтропия веществ и ее изменение в различных процессах. Стандартные энтропии веществ. Энергия Гиббса как мера химического сродства. Стандартные энергии Гиббса образования и сгорания веществ. Вычисление величин ΔG^0_{298} и ΔS^0_{298} процессов по справочным данным. Энтальпийный и энтропийный факторы процессов.	2 акад.ч.
5-6.	3	Практическое занятие 5-6. Константа химического равновесия K_c и K_p . Связь величины ΔG^0_T процесса с константой химического равновесия. Вычисление равновесного выхода продукта реакции. Смещение равновесия и принцип Ле-Шателье. Использование данных о температурной зависимости константы химического равновесия в термодинамических расчетах.	4 акад.ч.
7.	4	Практическое занятие 7. Важнейшие окислители и восстановители. Классификация ОВР. Влияние различных факторов на особенности протекания окислительно-восстановительных процессов. Периодический закон и окислительно-восстановительная активность элементов и их соединений.	2 акад.ч.
8.	4	Практическое занятие 8. Стандартные электродные потенциалы. Уравнение Нернста. Направление окислительно-восстановительных процессов; взаимосвязь величин ΔG^0 и ΔE^0 . Схемы Латимера. Расчет констант равновесия ОВР из электрохимических данных.	2 акад.ч.
9.	5	Практическое занятие 9. Ионная сила неассоциированных электролитов в растворах. Понятие о коэффициентах активности ионов и средне-ионных	2 акад.ч.

		коэффициентах активности солей. Вычисление рН разбавленных растворов неассоциированных электролитов с учетом и без учета ионной силы раствора.	
10.	5	Практическое занятие 10 Равновесие в растворах ассоциированных электролитов. Закон разбавления Оствальда. Расчет рН и концентрации ионов в растворах слабых электролитов. Буферные системы. Вычисление рН буферных растворов.	2 академ.ч.
11-12.	5	Практическое занятие 11-12. Количественные характеристики гидролиза солей – константа и степень гидролиза. Равновесия в водных растворах солей, образованных ионами различного валентного типа сильных, слабых кислот и оснований. Расчет рН растворов этих солей. Полный и необратимый гидролиз. Способы усиления и подавления гидролиза.	2 академ.ч.
13.	6	Практическое занятие 13. Классификация комплексных соединений. Систематическая номенклатура комплексных соединений. Равновесия в растворах комплексных соединений. Константы устойчивости нестойкости комплексного иона. Реакции образования и разрушения комплексных соединений.	2 академ.ч.
14-15.	6	Практическое занятие 14-15. Гетерогенное равновесие в системе, состоящей из насыщенного раствора малорастворимого сильного электролита и его кристаллов. Понятие и произведение растворимости (ПР). Вычисление растворимости солей с использованием величин ПР и активности ионов. Условия растворения и осаждения малорастворимого электролита. Влияние присутствия других ионов и величины рН раствора на растворимость.	4 академ.ч.
16.	6	Основные понятия и определения химической кинетики. Установление кинетического уравнения на основе экспериментальных данных (для реакций I и II порядков). Период полупревращения и расчеты, связанные с этой величиной. Понятие об энергии активации процесса. Уравнение Аррениуса. Вычисление энергии активации на основе экспериментальных данных о зависимости скорости реакции от температуры.	2 академ.ч.

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого по дисциплине *«Теоретические основы химии. Введение в физическую химию»*, а также способствует формированию у студентов навыков экспериментальной работы и развитию навыков исследовательской работы.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 20 баллов.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1		Основные понятия и законы химии. Основные классы неорганических соединений. Расчеты по уравнениям реакций.	4 академ.ч.
2		Техника безопасности и правила работы в лаборатории. Погрешности результатов численного эксперимента.	4 академ.ч.
3	4	Определение молярной массы углекислого газа.	4 академ.ч.
4	4	Приготовление раствора заданной концентрации.	4 академ.ч.
5	4	Определение концентрации раствора титрованием.	4 академ.ч.
6	4	Приготовление раствора заданной концентрации и титрование.	4 академ.ч.
7	4	Изучение окислительно-восстановительных реакций.	4 академ.ч.
8	4	Определение молярной массы эквивалента (I).	4 академ.ч.
9	4	Определение молярной массы эквивалента (II).	4 академ.ч.
10	6	Получение и свойства комплексных соединений.	4 академ.ч.
11	6	Гидролиз солей.	4 академ.ч.
12		Итоговое занятие Раздела 1	4 академ.ч.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *экзамена* (1 семестр) и лабораторного практикума (1 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 20 баллов) и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

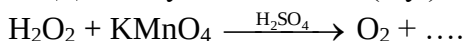
Для текущего контроля предусмотрено 4 контрольные работы. Максимальная оценка за контрольные работы составляет 10 баллов за каждую.

Для текущего контроля предусмотрено 4 контрольные работы в 1 семестре. Максимальная оценка за каждую контрольную работу – 10 баллов.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа состоит из 5 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1а. Для нейтрализации 0,60 г одноосновной кислоты необходимо 10,00 мл 1,00 М раствора едкого кали. Вычислить молярную массу эквивалента кислоты и её стронциевой соли в обменной реакции.

1б. Для получения 224 мл (н.у.) кислорода по реакции

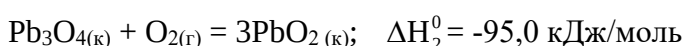
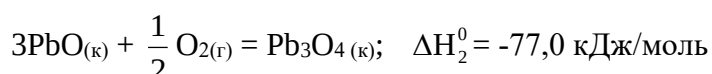
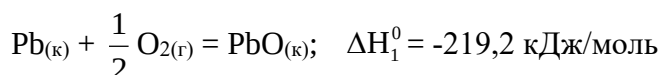


потребовалось 200 мл раствора KMnO_4 и 300 мл раствора H_2O_2 . Вычислить молярную концентрацию раствора окислителя и нормальную концентрацию раствора восстановителя.

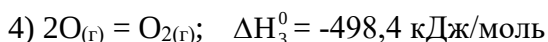
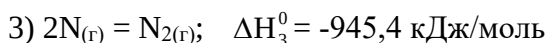
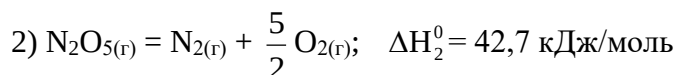
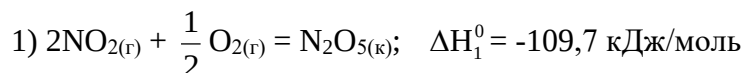
1в. Найдите молярную концентрацию эквивалента воды при её реакции: а) с металлическим натрием; б) с оксидом натрия.

2. Определите мольную долю KNO_3 , мольное отношение, молярность, моляльность и титр водного раствора, содержание KNO_3 в котором составляет 14 масс%, а плотность раствора равна $1,09 \text{ г/см}^3$.

3. Вычислить величину $(\Delta H_{f,298}^0)_{\text{PbO}_2(\text{к})}$, используя следующие данные:



4. Вычислите стандартную среднюю энтальпию связи азот-кислород по следующим данным:



5. При 323К и давлении 0,344 атм степень диссоциации $\text{N}_2\text{O}_4(\text{г})$ на $\text{NO}_2(\text{г})$ равна 63%. Вычислить K_c и K_p для процесса $\text{N}_2\text{O}_{4(\text{г})} \rightleftharpoons 2\text{NO}_{2(\text{г})}$.

Раздел 2. Контрольная работа №2. Контрольная работа состоит из 5 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1. Вычислить электродный потенциал таллиевой пластины, опущенной в раствор соли с концентрацией ионов Tl^+ , равной 10^{-2} моль/л. Использовать следующие данные:

$$\text{Pb}^{2+} + 2\text{e}^- = \text{Pb}; E_{298}^0 = -0,336 \text{ В}$$

2. Вычислить константу равновесия процесса окисления иодид ионов катионами Fe^{3+} в водном растворе при 298 К, если величины стандартных потенциалов восстановления для полуреакций составляют:

$$\text{I}_2 + 2\text{e}^- = 2\text{I}^- \quad E_{298}^0 = +0,536 \text{ В}; \quad \text{Fe}^{3+} + \text{e}^- = \text{Fe}^{2+} \quad E_{298}^0 = +0,771 \text{ В}$$

3. Вычислить равновесный потенциал электрода, на котором при 298 К протекает реакция $\text{PbO}_2 + 4\text{H}^+ + 2\text{e}^- = \text{Pb}^{2+} + \text{H}_2\text{O}$, если величина $(E_{298}^0)_{\text{PbO}_2/\text{Pb}} = 1,45 \text{ В}$. Концентрация ионов Pb^{2+} в растворе составляет 0,1 моль/л, а pH раствора равен 10.

4. Используя схему Латимера и следующие данные

$$\text{MnO}_4^- + 1\text{e}^- = \text{MnO}_4^{2-} \quad E_{298}^0 = +0,564 \text{ В}$$

$$\text{MnO}_4^{2-} + 1\text{e}^- = \text{MnO}_3^- \quad E_{298}^0 = +0,360 \text{ В}$$

$$\text{MnO}_3^- + 1\text{e}^- = \text{MnO}_2 \quad E_{298}^0 = +0,840 \text{ В},$$

вычислить при 298 К константу равновесия процесса



5. Закончить уравнения межмолекулярных реакций окисления – восстановления и определить факторы эквивалентности окислителей и восстановителей:



Раздел 3,4. Контрольная работа №3. Контрольная работа состоит из 5 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1. Вычислить ионную силу водного раствора хлорида бария при 298 К (молярная концентрация $m = 0,002 \text{ моль/1000 г H}_2\text{O}$), а также коэффициенты активности ионов $\gamma_{\text{Ba}^{2+}}$, γ_{Cl^-} и средне-ионный коэффициент активности соли.

2. В растворе содержится смесь KCl и K_2CrO_4 , в котором $[\text{Cl}^-] = [\text{CrO}_4^{2-}] = 0,1 \text{ моль/л}$. К данному раствору прибавляют по каплям раствор AgNO_3 . Какая их солей будет осаждаться в первую очередь? Ответ подтвердить расчетом. Какова должна быть концентрация ионов Cl^- в растворе, при которой в осадок выпадают одновременно две соли, если концентрация хромат-ионов $[\text{CrO}_4^{2-}] = 0,1 \text{ моль/л}$. $\text{PP}_{\text{AgCl}} = 1,78 \cdot 10^{-10}$; $\text{PP}_{\text{Ag}_2\text{CrO}_4} = 1,1 \cdot 10^{-12}$.

3. Вычислить растворимость SrSO_4 в 0,05 М в растворе Na_2SO_4 без учета и с учетом солевого эффекта (с использованием активностей). $\text{PP}_{\text{SrSO}_4} = 3,2 \cdot 10^{-7}$.

4. 1М раствор слабой одноосновной кислоты имеет pH=4. Вычислить pH 0,1 М раствора этой кислоты. Какова степень диссоциации кислоты в 0,1 М растворе?

5. Используя следующие данные

$$(\Delta G_{f,298}^0)_{\text{H}^+ (\text{p-р, ст. сост.})} = 0; (\Delta G_{f,298}^0)_{\text{PO}_4^{3-} (\text{p-р, ст. сост.})} = -1012,6$$

$$\text{кДж/моль}; (\Delta G_{f,298}^0)_{\text{HPO}_4^{2-} (\text{p-р, ст. сост., гип. недисс.})} = -1083,2 \text{ кДж/моль},$$

вычислить константу диссоциации гидрофосфат-иона.

Раздел 5,6. Контрольная работа №4. Контрольная работа состоит из 5 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1а. Привести названия следующих комплексных соединений и ионов по систематической номенклатуре: $[\text{Ru}(\text{N}_2)(\text{NH}_3)_5]^{2+}$, $[\text{AlH}_6]^{3-}$, $[\text{Sb}_6\text{F}_{13}]\text{F}_5$, $\text{K}[\text{Nd}(\text{SO}_4)_2]$, $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{CN})_6]$ $[\text{NiI}_4]$.

1б. Составить формулы комплексных соединений по их названиям: тетракарбонатодиродат(III) бария; гексафторостибат(V) тетрафторониобия (V); гексанитрокобальтат(III) натрия; трихлорэтиленплатинат(II) калия; хлорид хлоротетрааммин(диоксид серы)рутения(II).

2. В 0,1М раствор $\text{K}[\text{Ag}(\text{CN})_2]$, содержащий избыток цианида калия в количестве вещества 1 моль в 1л раствора, добавили сульфид калия массой 1,10 г на 1 л раствора. Определить, выпадет ли осадок сульфида серебра? Константа устойчивости иона $[\text{Ag}(\text{CN})_2]^-$

$$\beta_{[\text{Ag}(\text{CN})_2]^-} = 6,35 \cdot 10^{20}; \text{IP}_{\text{Ag}_2\text{S}} = 6,88 \cdot 10^{-50}.$$

3. Используя следующие данные:

	$(\Delta G_{f,298}^0),$ кДж/моль		$(\Delta G_{f,298}^0),$ кДж/моль
$\text{Ni}^{2+}_{(\text{p-р, ст. сост.})}$	-45,6	$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}_{(\text{p-р, ст. сост., гип. недисс.})}$	468,4
$\text{CN}^-_{(\text{p-р, ст. сост.})}$	171,6	$[\text{AgBr}_2]^-_{(\text{p-р, ст. сост., гип. недисс.})}$	-172,9
$\text{Ag}^+_{(\text{p-р, ст. сост.})}$	77,1		
$\text{Br}^-_{(\text{p-р, ст. сост.})}$	-104,1		

вычислить константу устойчивости иона $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$ и константу нестойкости иона $[\text{AgBr}_2]^-$.

4. Вычислить pH 0,1 М раствора нитрата металла (II), если константа диссоциации иона MeOH^+ составляет $1,0 \cdot 10^{-7}$.

5. Вычислить pH 0,1 М раствора K_2CO_3 , если константы ступенчатой диссоциации угольной кислоты равны $K_{a_1} = 4,5 \cdot 10^{-7}$; $K_{a_2} = 4,8 \cdot 10^{-11}$. (При вычислении ограничиться рассмотрением первой степени гидролиза)

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – экзамен).

Экзаменационный) билет включает контрольные вопросы по разделам рабочей программы дисциплины и содержит 3 вопроса, по 20 баллов за вопрос.

1. Понятие о химическом эквиваленте и факторе эквивалентности в обменных и окислительно-восстановительных реакциях. Закон эквивалентов. Расчёты с использованием закона эквивалентов.
2. Понятие о химической термодинамике. Основные понятия и определения химической термодинамики. Классификация термодинамических систем. Характеристические функции состояния. Самопроизвольные и несамопроизвольные процессы.
3. Внутренняя энергия и энтальпия, их изменение в различных процессах.
4. Термохимия-предмет изучения. Экзо- и эндотермические реакции. Термохимические уравнения. Масштаб тепловых эффектов различных процессов.
5. Понятие о стандартном состоянии: а) для веществ, находящихся в конденсированной (жидкой или твердой) фазе.
6. Стандартные энтальпии образования, сгорания и растворения веществ, образующих сильные электролиты в растворах.
7. Закон Гесса и его следствия. Использование закона Гесса в различных термохимических циклах для вычисления энтальпий химических связей (энергий связей), энтальпий присоединения воды к безводной соли с образованием кристаллогидратов, энтальпий растворения солей.
8. Химически обратимые и необратимые процессы. Термодинамически обратимые равновесные процессы. Понятие об энтропии (работы Клаузиуса). Изменение энтропии в обратимых и необратимых процессах в изолированной системе. Критерий самопроизвольно протекающего процесса в изолированной системе.
9. Статистический смысл энтропии. Формула Больцмана. Энтропия как мера неупорядоченности системы. Зависимость энтропии от температуры. III закон термодинамики. Стандартные энтропии веществ. Энтропия и природа веществ. Изменение энтропии в различных процессах.
10. Истинное и кажущееся химические равновесия, их признаки. Константа химического равновесия K_c и K_p , взаимосвязь между ними. Равновесие в гомогенных и гетерогенных системах.
11. Энергия Гиббса, её физический смысл и связь с энтальпией и энтропией. Изменение энергии Гиббса как мера химического сродства. Критерии возможности и невозможности протекания самопроизвольного процесса.
12. Стандартные энергии Гиббса образования и сгорания веществ. Вычисление величин ΔG° различных процессов. Энтальпийный и энтропийный факторы химического процесса.
13. Принцип смещения равновесия Ле-Шателье. Влияние различных факторов (давления, температуры, концентрации компонентов, катализаторов, добавок инертного газа) на смещение равновесия.

14. Взаимосвязь величины ΔG° процесса с константой химического равновесия. Вычисление равновесного выхода реакции.
15. Влияние температуры на химическое равновесие. Использование уравнения, выражающего зависимость константы химического равновесия от температуры в термодинамических расчетах.
16. Процессы, сопровождающие образование жидких истинных растворов электролитов и неэлектролитов. Сольватация в растворах. Идеальные растворы. Гомогенные равновесия в растворах электролитов. Ассоциированные и неассоциированные электролиты. Ионная сила растворов неассоциированных электролитов. Понятие о коэффициенте активности и активности как мере отклонения свойств компонента в реальном растворе от его свойств в идеальном растворе. Вычисление коэффициентов активности по уравнению Дебая-Хюккеля для очень разбавленных растворах электролитов.
17. Равновесия в растворах ассоциированных электролитов. Степень и константа электролитической диссоциации. Зависимость степени электролитической диссоциации от концентрации (закон разбавления Оствальда).
18. Ионное произведение воды. Зависимость K_w от температуры. Водородный и гидроксильный показатели.
19. Вычисление pH разбавленных растворов сильных кислот и оснований с учетом и без учета ионной силы растворов.
20. Вычисление pH растворов слабых кислот и оснований.
21. Равновесия в растворах многоосновных кислот. Расчёт концентраций ионов в растворах слабых кислот при заданном значении pH .
22. Влияние одноименных ионов на равновесие диссоциации слабого электролита. Буферные системы. Вычисление pH буферных растворов. Понятие о буферной ёмкости растворов.
23. Гетерогенные равновесия в системе, состоящей из насыщенного раствора малорастворимого сильного электролита и его кристаллов. Понятие о произведении растворимости (PP). Вычисление растворимости солей с использованием величин PP . Влияние одноименных ионов на растворимость малорастворимого сильного электролита. Условия выпадения и растворения осадка.
24. Понятие о стандартном состоянии раствора. Шкала термодинамических функций ионов в водных растворах. Вычисление констант диссоциации слабых электролитов и констант устойчивости комплексных ионов по справочным термодинамическим данным.
25. Кислотно-основные равновесия в водных растворах солей. Гидролиз солей. Типы гидролиза солей (гидролиз неполный обратимый, гидролиз неполный необратимый, полный (совместный) гидролиз).
26. . Равновесия в растворах солей, образованных:
- а) однозарядным анионом слабой кислоты и катионом сильного основания;
 - б) многозарядным анионом слабой кислоты и катионом сильного основания;
 - в) гидросолями (амфолитами) сильных оснований;
 - г) однозарядным катионом слабого основания и анионом сильной кислоты;
 - д) многозарядным катионом слабого основания и анионом сильной кислоты;
 - е) однозарядным катионом и анионом слабой кислоты и слабого основания;
 - ж) однозарядным катионом и многозарядным анионом слабой кислоты и слабого основания;

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия. Учебник для вузов. М.: Химия, 2000. 592с.
2. Неорганическая химия. В 3-ех томах. /под редакцией Ю.Д. Третьякова/ Том 2. Химия непереходных элементов. М.:Академия. 2004. Том 3.(в двух книгах) Химия переходных элементов. М.: Академия. 2007.
3. А.В.Шевельков, А.А. Дроздов, М.Е. Тамм. Неорганическая химия. Учебник. Под ред. А.В. Шевелькова.-М.: Лаборатория знаний, 2021-586с. :ил.
4. Практикум по неорганической химии / Под ред. А.Ф. Воробьева и С.И. Дракина. М.: ТИД «Альянс», 2004. 249 с.
5. Власенко К.К., Дупал А.Я., Соловьев С.Н. Домашние задания по общей и неорганической химии. Часть 1. РХТУ им.Д.И. Менделеева. 2015. 186 с.
6. Власенко К.К., Дупал А.Я., Соловьев С.Н. Домашние задания по общей и неорганической химии. Часть 2. РХТУ им.Д.И. Менделеева. 2015. 150 с.

Б. Дополнительная литература

1. Соловьев С.Н. Начала химии. Элементы строения вещества (конспект лекций, задачи, упражнения). М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2004. 108 с.
2. Соловьев С.Н. Начала химии. Теоретические основы химии (конспект лекций, задачи, упражнения). М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2004. 148 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

1. Коллоидный журнал ISSN 0023-2912
2. Журнал физической химии ISSN 0044-4537
3. Стекло и керамика ISSN 0131-9582
4. Physical Chemistry Chemical Physics ISSN 1463-9076
5. Journal of Colloids and Interface Science ISSN 0021-9797
6. Microporous and Mesoporous Materials ISSN 1387-1811
7. Journal of Physical Chemistry ISSN 0022-3654
8. Adsorption ISSN 0929-5607
9. Langmuir ISSN 0743-7463

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://www.portalnano.ru/> - Нанотехнологии и наноматериалы. Федеральный интернет-портал
- www.centerprioritet.ru – СМЦ «Приоритет» - техническая документация исследований (ИКСИ) – заказ литературы, русскоязычные издания
- <http://www.nanometer.ru/> - "Нанометр" - нанотехнологическое сообщество
- <http://nano-portal.ru/> - Нано Портал - Нанотехнологии России
- www.sciyo.com - Read, download & share more than 273 FREE SCIENTIFIC BOOKS
- <http://www.rsl.ru> - Российская Государственная Библиотека
- <http://www.gpntb.ru> - Государственная публичная научно-техническая библиотека России

- <http://lib.msu.su> - Научная библиотека Московского государственного университета
- <http://window.edu.ru> - Полнотекстовая библиотека учебных и учебно-методических материалов
- <http://abc-chemistry.org/ru/> - ABC-Chemistry: Бесплатная научная химическая информация
- <http://www.fips.ru/cdfi/fips2009.dll> - Сайт ФИПС. Информация о патентах
- <http://findebookee.com/> - поисковая система по книгам

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 200);
- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 300);

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Теоретические основы химии. Введение в физическую химию*» проводятся в форме лекционных, семинарских, лабораторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная средствами демонстрации и учебной мебелью.

Оборудованная лаборатория: аквадистилляторы ДЭ-10 ЭМО; аквадистиллятор АЭ-25 ООО «Ливам ПФ», рН-метры с автоматической и ручной компенсацией температуры ИПЛ 301, рН-метр-милливольтметр рН-420; стандарт-титр рН метрия общая ООО «ХИМТИТРЫ», лабораторные электронные весы: весы Citizen Scale CY-223, весы CitizenScale CY-124C, весы электронные аналитические MB-210A, весы аналитические AND HR-100AG, весы OHAUS V11P15, весы Citizen Scale CY-1202, весы лабораторные ВЛТЭ-510С, весы порционные AND HT-500 (500г, 0,1г, внешняя калибровка), весы Citizen Scale CY-224; колба нагреватель КН-500 Stegler, мешалка магнитная STEGLER HS сподогревом, спектрофотометр однолучевого СФ-104 с разделением светового потока сканирующий, спектрофотометр однолучевой СФ-102 с разделением светового потока ионизметр И-510, шкафы сушильные ШС-40-ПЗ; шкаф сушильный (тип 2) ШС-40-02 СПУ мод. 2204, шкаф сушильный (тип 1) ШС-20-02 СПУ мод. 2202, шкаф сушильный (тип 3) ШС-80-02 СПУ мод. 2208 жидкостной циркуляционный термостат ВТ10-1(+20...+100 °С), термостат жидкостной LOIP LT 124a; ВТ3-1 (+20...+100 °С); ВТ5-1(+20...+100 °С) жидкостной циркуляционный термостат, 5 л.; электрическая плита IRITIR-8004 IRIT; столик подъемный лабораторный металлический (тип 1) НВ-150 Stegler, сушилка для пробирок (тип 1) 0362А (полипропилен) Stegler, сушилка для пробирок (тип 2) 0362В (полипропилен) Stegler. Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева, комплект наглядных материалов.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Перечень средств.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к Разделам лекционного курса.

Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Химический эквивалент.	<i>Знает:</i> – электронное строение атомов и молекул <i>Умеет:</i> – выполнять основные химические операции,	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр)

	определять термодинамические характеристики химических реакций и равновесные концентрации веществ <i>Владеет:</i> – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов – экспериментальными методами определения физико-химических свойств неорганических соединений	Оценка за <i>экзамен</i> (1 семестр)
Раздел 2. Элементы химической термодинамики	<i>Знает:</i> – основы теории химической связи в соединениях разных типов, строение вещества в конденсированном состоянии <i>Умеет:</i> – использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач <i>Владеет:</i> – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов – экспериментальными методами определения физико-химических свойств неорганических соединений	Оценка за контрольную работу №1 (2 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (1 семестр)
Раздел 3. Химическое равновесие	<i>Знает:</i> – основные закономерности протекания химических процессов и характеристики равновесного состояния <i>Умеет:</i> – использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач <i>Владеет:</i> – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов – экспериментальными методами определения физико-химических свойств неорганических соединений	Оценка за контрольную работу №3 (1 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (1 семестр)

Раздел 4. Растворы.	<i>Знает:</i> – методы описания химических равновесий в растворах электролитов <i>Умеет:</i> – использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач <i>Владеет:</i> – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов – экспериментальными методами определения физико-химических свойств неорганических соединений	Оценка за контрольную работу №3 (1 семестр) Оценка за лабораторный практикум (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 5. Элементы химической кинетики	<i>Знает:</i> – строение и свойства координационных соединений <i>Умеет:</i> – прогнозировать влияние различных факторов на равновесие в химических реакциях <i>Владеет:</i> – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов – экспериментальными методами определения физико-химических свойств неорганических соединений	Оценка за контрольную работу №4 (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)
Раздел 6. Окислительно-восстановительные процессы и электрохимические процессы	<i>Знает:</i> – строение и свойства координационных соединений <i>Умеет:</i> – прогнозировать влияние различных факторов на равновесие в химических реакциях <i>Владеет:</i> – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов – экспериментальными методами определения физико-химических свойств неорганических соединений	Оценка за контрольную работу №4 (1 семестр) Оценка за лабораторный практикум (1 семестр) Оценка за экзамен (1 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**«Теория вероятностей и статистическая обработка результатов
эксперимента»**

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена ассистентом кафедры Сколтеха к.ф.-м.н. Лободой А.А.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направления подготовки **04.03.01 Химия**, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Теория вероятностей и статистическая обработка результатов эксперимента»** относится к обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области математического анализа.

Цель дисциплины – освоение студентами теоретических подходов и практических методов анализа химических данных, применяемых в современной мировой науке и системное представление о статистических, дескриптивных и графических методах анализа данных.

Задачи дисциплины

- получить представление о роли теории вероятностей и математической статистики в профессиональной деятельности;
- получить необходимые знания из области теории вероятностей и математической статистики для дальнейшего самостоятельного освоения научно-технической информации;
- получить представление о применении положений теории вероятностей и математической статистики при исследовании и моделировании химических процессов.

Дисциплина **«Теория вероятностей и статистическая обработка результатов эксперимента»** преподается в 4 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Общепрофессиональных компетенций и индикаторов их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные положения теории вероятностей и математической статистики, необходимые для решения прикладных задач;
- методологию, методы и приёмы проведения количественного анализа и моделирования поведения технических систем, событий и процессов;
- методы теоретического и экспериментального исследования в области решения задач профессиональной деятельности ;

Уметь:

- применять основные методы теории вероятностей и математической статистики для решения профессиональных задач; пользоваться математической литературой для самостоятельного изучения инженерных вопросов;
- решать типовые математические задачи, используемые при принятии технических решений;
- строить математические модели прикладных задач и исследовать эти модели, обрабатывать эмпирические и экспериментальные данные;

Владеть:

- современными методами теории вероятностей и математической статистики для построения математических моделей задач, возникающих в инженерной практике;
- навыками применения современного математического инструментария для решения прикладных задач;

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,78	64	48,15
Лекции	0,89	32	24
Практические занятия (ПЗ)	0,89	32	24
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,22	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,22	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов		43,6	32,7
Вид итогового контроля:	Зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лек-ции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1. Случайные величины и их законы распределения.	21	6	6	9
1.1	Случайные события	7	2	2	3
1.2	Распределение случайных величин.	7	2	2	3
1.3	Характеристики распределения случайных величин.	7	2	2	3
2.	Раздел 2. Математическая статистика.	66	20	20	26
2.1	Статистические данные	13	4	4	5
2.2	Дескриптивные и графические методы анализа данных	13	4	4	5
2.3	Статистическое оценивание.	13	4	4	5
2.4	Статистическая проверка гипотез.	13	4	4	5
2.5	Методы многомерного статистического анализа	14	4	4	6
3.	Раздел 3. Исследование зависимостей.	21	6	6	9
3.1	Линейный регрессионный анализ.	7	2	2	3
3.2	Дисперсионный анализ.	7	2	2	3
3.3	Планы эксперимента со случайными блоками.	7	2	2	3
	ИТОГО	108	32	32	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Случайные величины и их законы распределения.

1.1 Случайные события

Пространство элементарных исходов и случайные события; операции над событиями; вероятности событий и их свойства; условная вероятность и независимость событий; теорема Бернулли; формула полной вероятности и формула Байеса; Формула Бернулли; случайные величины и функция распределения вероятностей; дискретные случайные величины; непрерывные случайные величины и функция плотности вероятностей; характеристики распределения случайной величины: математическое ожидание, дисперсия, медиана, мода и др.;

1.2. Распределение случайных величин.

Распределение Бернулли, биномиальное распределение, распределение Пуассона, непрерывное и дискретное равномерные распределения, нормальное и логнормальное распределения; центральная предельная теорема; распределения, связанные с нормальным: распределение хи-квадрат, распределение Стьюдента и распределение Фишера.

1.3. Характеристики распределения случайных величин.

Математическое ожидание, дисперсия, среднее квадратическое отклонение, коэффициент вариации, момент порядка ν , центральный момент порядка ν , коэффициент асимметрии, коэффициент эксцесса, медиана, мода, первая и третья квартили, интерквартильный размах, квантиль порядка p . Неравенство Чебышева. Статистические таблицы;

многомерные случайные величины и их распределения; условные распределения и независимость случайных величин; коэффициент корреляции; двумерное нормальное распределение.

Раздел 2. Математическая статистика.

2.1. Статистические данные

Понятие случайной выборки; примеры реальных химических экспериментов; многомерные статистические данные: матрица экспериментальных данных, переменные и наблюдения, количественные, номинальные и ранговые переменные.

2.2. Дескриптивные и графические методы анализа данных.

Гистограмма; эмпирическая функция распределения; полигон частот; таблица частот; двумерные диаграммы рассеяния; множественные двумерные диаграммы рассеяния; трехмерные диаграммы рассеяния; множественные трехмерные диаграммы рассеяния; столбчатые диаграммы; секторные диаграммы; составные линейные диаграммы; звездные графики; лучевые графики; оконные графики; разведочный анализ данных.

2.3. Статистическое оценивание.

Понятие статистической оценки; свойства оценок: несмещенность, состоятельность, эффективность; метод максимального правдоподобия; точечное оценивание характеристик распределения (эмпирическая частота, выборочное среднее, выборочная дисперсия, выборочное среднеквадратическое отклонение, выборочный коэффициент вариации, выборочный коэффициент асимметрии, выборочный коэффициент эксцесса, выборочная медиана, выборочные квартили и интерквартильный размах, выборочная мода, выборочные квантили, выборочный коэффициент корреляции); интервальное оценивание; доверительный интервал для неизвестной вероятности; доверительные интервалы для математического ожидания и дисперсии нормального распределения; доверительный интервал для коэффициента корреляции.

2.4 Статистическая проверка гипотез.

Логика проверки статистических гипотез; ошибки первого и второго рода, уровень значимости и мощность критерия; одновыборочные и двухвыборочные t -критерий и F -критерий; сравнение параметров двух биномиальных и двух пуассоновских распределений; проверка значимости отличия от нуля коэффициента корреляции; критерии согласия (χ^2 -квадрат критерий, одновыборочный критерий Колмогорова–Смирнова); непараметрические критерии: критерий Манна–Уитни для проверки гипотезы об отсутствии сдвига; критерий однородности – двухвыборочный критерий Колмогорова–Смирнова; критерий Спирмена для проверки гипотезы о независимости признаков.

2.5 Методы многомерного статистического анализа.

Классификация методов многомерного статистического анализа; методы анализа связи между двумя системами переменных: корреляционный анализ, регрессионный анализ, дисперсионный анализ и дискриминантный анализ; методы анализа структуры многомерных данных: кластерный анализ, факторный анализ и анализ главных

Раздел 3. Исследование зависимостей.

3.1. Линейный регрессионный анализ.

Множественная линейная регрессия; метод наименьших квадратов; доверительные интервалы и проверка гипотез в линейном регрессионном анализе; множественный и частный коэффициенты корреляции; пошаговый регрессионный анализ; нелинейный регрессионный анализ;

3.2 Дисперсионный анализ.

Однофакторный и многофакторный дисперсионный анализ для моделей с постоянными уровнями факторов: проверка гипотез; методы множественного сравнения; модели со случайными уровнями факторов: проверка гипотез; коэффициент внутриклассовой корреляции; смешанные модели дисперсионного анализа.

3.3 Планы эксперимента со случайными блоками.

Планы с группировкой; непараметрические методы анализа связи между количественной и качественными переменными.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	– основные положения теории вероятностей и математической статистики, необходимые для решения прикладных задач;		+	+
2	– методологию, методы и приёмы проведения количественного анализа и моделирования поведения технических систем, событий и процессов;	+		
	– методы теоретического и экспериментального исследования в области решения задач профессиональной деятельности;		+	+
	Уметь:			
3	– применять основные методы теории вероятностей и математической статистики для решения профессиональных задач;		+	+
4	– решать типовые математические задачи, используемые при принятии технических решений;	+		
	– строить математические модели прикладных задач и исследовать эти модели, обрабатывать эмпирические и экспериментальные данные;		+	+
	Владеть:			
5	– современными методами теории вероятностей и математической статистики для построения математических моделей задач;	+	+	+
6	– навыками применения современного математического инструментария для решения прикладных задач;		+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>универсальные и общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>				
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК		
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК		

9	ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Вероятностные модели. Понятие случайного испытания. Пространство элементарных событий. Операции над событиями. Полная система событий.	2
2	1	Теорема Бернулли. Примеры введения вероятностей событий в химических задачах. Вероятностное пространство. Модели вероятностного пространства.	2
3	1	Условная вероятность. Независимость событий, Формула полной вероятности. Формула Байеса.	2
4	1	Одномерная случайная величина. Функция распределения случайной величины и ее свойства. Дискретные случайные величины. Непрерывные случайные величины. Функция плотности вероятностей и ее свойства.	2
5	1	Нормально распределенная случайная величина. Стандартное нормальное распределение. Центральная предельная теорема. Распределения случайных величин.	2
6	1	Характеристики распределений. Математическое ожидание случайной величины и его свойства. Дисперсия случайной величины и ее свойства. Неравенство Чебышева.	2
7	1	Характеристики положения и разброса случайной величины. Примеры вычисления рассмотренных характеристик.	2
8	1	Многомерные случайные величины. Функция распределения многомерной случайной величины и ее свойства. Ковариация и коэффициент корреляции двух случайных величин. Свойства коэффициента корреляции. Двумерное нормальное распределение.	2
9	2	Генеральная совокупность. Простой случайный выбор. Случайная выборка. Эмпирическая функция распределения. Гистограмма выборки	2
10	2	Точечное статистическое оценивание. Выборочные оценки. Свойства оценок: несмещенность; состоятельность; Эффективность. Достаточное условие состоятельности. Выборочные характеристики. Методы получения выборочных оценок. Метод максимального правдоподобия.	2
11	2	Интервальное статистическое оценивание. Доверительный интервал. Доверительная вероятность. Центральные и нецентральные доверительные интервалы. Доверительный интервал для математического ожидания нормально распределенной случайной величины.	2
12	2	Доверительный интервал для дисперсии нормально распределенной случайной величины; параметра биномиального распределения; пуассоновского распределения; для коэффициента корреляции.	2
13	2	Статистическая проверка гипотез. Простые и сложные	2

		альтернативные гипотезы. Статистика критерия. Критическая область. Вероятности ошибок первого и второго родов. Уровень значимости критерия. Мощность критерия. Параметрические и непараметрические критерии проверки статистических гипотез	
14	2	Одновыборочный t-критерий. Двухвыборочный t-критерий для независимых выборок и для связанных выборок. Одновыборочный хи-квадрат критерий. Двухвыборочный F-критерий. Сравнение параметров двух биномиальных распределений; двух пуассоновских распределений. Проверка гипотезы о равенстве заданному числу коэффициента корреляции	2
15	3	Регрессионный анализ. Модели линейного и нелинейного регрессионного анализа. Множественная линейная регрессия. Метод наименьших квадратов. Пошаговый регрессионный анализ.	2
16	3	Дисперсионный анализ. План эксперимента. Модели дисперсионного анализа: с постоянными факторами; со случайными факторами; смешанные модели. Задачи, решаемые дискриминантным анализом и анализом таблиц сопряженности.	2

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине **«Теория вероятностей и статистическая обработка результатов эксперимента»** не предусмотрены.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Рабочей программой дисциплины **«Теория вероятностей и статистическая обработка результатов эксперимента»** предусмотрена самостоятельная работа студента бакалавриата в объеме 44 ак.ч. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **зачёта с оценкой** по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов и итогового контроля в форме **Зачёта с оценкой** (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы составляет по 30 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Примеры вариантов к контрольной работе № 10. Контрольная работа содержит 5 вопросов по 6 баллов за вопрос.

Вариант 1

- 1). В цехе работают 6 мужчин и 4 женщины. По табельным номерам наудачу отобрали 7 человек. Найти вероятность того, что среди отобранных лиц окажутся 3 женщины.
- 2). Три стрелка стреляют по одной мишени. Первый попадает с вероятностью $p_1 = 0,8$, второй – $p_2 = 0,7$, третий – $p_3 = 0,6$. Найти вероятность того, что при одном залпе в мишень попадет хотя бы один стрелок.
- 3). В первой коробке находится 20 батареек для фонарика, из них 18 годных к употреблению. Во второй коробке – 10 батареек, из них – 9 годных. Из второй коробки наудачу взяли 2 батарейки и переложили в первую. Найти вероятность того, что батарейка, наудачу извлеченная из первой коробки, будет годной.
- 4) Случайная величина ξ имеет ряд распределения:

ξ	-4	-2	0	1	2
p	0,1	0,2	0,3	0,3	0,1

Найти математическое ожидание $M[\xi]$ и дисперсию $D[\xi]$.

- 5). Плотность распределения вероятностей случайной величины ξ имеет вид:

$$f(x) = \begin{cases} 2(x-1), & x \in [1; 2] \\ 0, & x \notin [1; 2] \end{cases}$$

Найти: функцию распределения вероятностей $F(x)$ и ее график, $M[\xi]$, $D[\xi]$, $P(1,5 < \xi < 3)$.

Вариант 2

- 1). Из водоема, в котором находится 10 рыб, вылавливают 6 рыб, помечают и выпускают их обратно. Найти вероятность того, что второй улов того же объема содержит 4 меченые рыбы.
- 2). В урне 12 шаров, из которых 7 белых. Наудачу вытаскивается один шар, а затем возвращается обратно в урну. Найти вероятность хотя бы одного извлечения белого шара, если шар извлекали дважды.
- 3). В пирамиде установлены 15 винтовок, 10 из них снабжены оптическим прицелом. При стрельбе из винтовки с оптическим прицелом вероятность поражения мишени – 0,9, а при стрельбе из обычной винтовки – 0,7. Какова вероятность того, что стрелок поразил мишень из наудачу взятой винтовки? Найти также вероятность того, что мишень поражена из винтовки с оптическим прицелом.
- 4). Случайная величина ξ имеет ряд распределения:

ξ	1	3	4	6	7
p	0,1	0,1	0,3	0,4	0,1

Найти математическое ожидание $M[\xi]$ и дисперсию $D[\xi]$.

5). Плотность распределения вероятностей случайной величины ξ имеет вид:

$$f(x) = \begin{cases} 2 - \frac{x}{2}, & x \in [2; 4] \\ 0, & x \notin [2; 4] \end{cases}$$

Найти: функцию распределения вероятностей $F(x)$ и ее график, $M[\xi]$, $D[\xi]$, $P(3 < \xi < 5)$.

Раздел 2. Примеры вариантов к контрольной работе № 2.. Контрольная работа содержит 3 вопроса по 10 баллов за вопрос.

Вариант 1

1. По заданной выборке

45	46	58	59	47	55	58	46	45
38	40	41	62	43	61	40	42	50
58	41	51	44	47	47	47		

- 1) составить вариационный ряд;
- 2) вычислить относительные частоты;
- 3) построить полигон относительных частот;
- 4) составить эмпирическую функцию распределения;
- 5) построить график эмпирической функции распределения;
- 6) найти оценки математического ожидания, дисперсии и среднеквадратичного отклонения ($\bar{x}_e, D_e, \sigma = \sqrt{D_e}, S^2, S = \sqrt{S^2}$).

2. По заданной выборке

1,0	1,1	1,3	0,9	1,2	1,1	0,8	1,0	1,2

- 1) составить вариационный ряд;
- 2) построить доверительные интервалы при $\gamma = 0,95$ для
 - а) математического ожидания при известной дисперсии $\sigma = S$;
 - б) математического ожидания при неизвестной дисперсии;
 - в) среднеквадратичного отклонения.

3. По двум независимым выборкам, объемы которых $n = 12$ и $m = 16$, извлеченным из нормальных генеральных совокупностей X и Y с неизвестными дисперсиями, найдены исправленные дисперсии: $s_X^2 = 9,52$ и $s_Y^2 = 4,1$. При уровне значимости $0,05$ проверить гипотезу $H_0 : D[X] = D[Y]$ при конкурирующей гипотезе $H_1 : D[X] > D[Y]$.

Вариант 2

1. По заданной выборке

7	4	9	13	9	9	13	9	11
11	11	5	12	9	10	15	14	10
10	12	8	10	11	10	4		

- 1) составить вариационный ряд;
- 2) вычислить относительные частоты;
- 3) построить полигон относительных частот;

- 4) составить эмпирическую функцию распределения;
- 5) построить график эмпирической функции распределения;
- 6) найти оценки математического ожидания, дисперсии и среднеквадратичного отклонения ($\bar{x}_e, D_e, \sigma = \sqrt{D_e}, S^2, S = \sqrt{S^2}$).

2. По заданной выборке

2,0 2,1 2,5 1,9 2,3 2,4 2,2 2,3

- 1) составить вариационный ряд;
- 2) построить доверительные интервалы при $\gamma = 0,95$ для
 - а) математического ожидания при известной дисперсии $\sigma = S$;
 - б) математического ожидания при неизвестной дисперсии;
 - в) среднеквадратичного отклонения.
3. Автомат, работающий со стандартным отклонением $\sigma = 1$ г, фасует чай в пачки со средним весом $a = 100$ г. В случайной выборке объемом $n = 25$ пачек средний вес $\bar{X} = 101,5$ г. Надо ли отрегулировать автомат? Доверительная вероятность $\gamma = 0,95$.

8.2. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (4 семестр – зачёт с оценкой).

Максимальное количество баллов за зачёт с оценкой – 40. Билет для зачёта содержит 6 вопросов. Первый и второй вопрос – по 6 баллов, с третьего по шестой вопросы по -7 баллов.

8.2.1. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (4 семестр – зачёт с оценкой).

1. Пространство элементарных событий. Привести три примера.
2. Операции над событиями. Несовместные события. Привести примеры.
3. Задание вероятностного пространства. Привести примеры.
4. Свойства вероятности.
5. Условная вероятность. Привести примеры. Теорема умножения.
6. Формула полной вероятности.
7. Формула Байеса.
8. Независимые события. Привести примеры.
9. Формула Бернулли. Определить вероятность выпадения ровно 1 герба при 5-ти бросаниях правильной монеты.
10. Случайная величина. Привести три примера.
11. Функция распределения и ее свойства.
12. График функции распределения для какой-нибудь конкретной дискретной случайной величины.
13. Дискретная случайная величина. Привести примеры.
14. Распределение Бернулли. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины, распределенной по Бернулли.
15. Биномиальное распределение. Математическое ожидание и дисперсия биномиально распределенной случайной величины.
16. Распределение Пуассона. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины, распределенной по Пуассону.
17. Непрерывная случайная величина. Свойства функции плотности.
18. Непрерывное равномерное распределение. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины, распределенной по равномерному закону на интервале (a,b).
19. Логнормальное распределение.

20. Нормальное распределение.
21. χ^2 –распределение, t- распределение, F- распределение.
22. Математическое ожидание случайной величины и его свойства.
23. Дисперсия случайной величины и ее свойства.
24. Средне-квадратическое отклонение и коэффициент вариации случайной величины.
25. Моменты, центральные моменты, абсолютные моменты случайной величины.
26. Коэффициенты асимметрии и эксцесса случайной величины.
27. Медиана, нижняя и верхняя квартили случайной величины.
28. Интерквартильный размах, мода случайной величины.
29. Квантили и процентиля распределения.
30. Многомерная случайная величина.
31. Коэффициент корреляции двух случайных величин и его свойства (без доказательства).
32. Случайная выборка. Выборочные значения. Объем выборки.
33. Гистограмма. График гистограммы для какого-нибудь примера.
34. Эмпирическая функция распределения. График этой функции для какого-нибудь примера.
35. Точечное оценивание. Несмещенные оценки.
36. Состоятельные оценки. Достаточное условие состоятельности.
37. Выборочное среднее, выборочная дисперсия; выборочное средне-квадратическое отклонение; выборочный коэффициент вариации.
38. Доказать несмещенность и состоятельность выборочного среднего, как оценки математического ожидания.
39. Выборочная квантиль, выборочная медиана, выборочные нижняя и верхняя квартили, выборочная мода.
40. Выборочные коэффициенты асимметрии и эксцесса.
41. Выборочный коэффициент корреляции.
42. Доверительный интервал для математического ожидания нормального распределения.
43. Доверительный интервал для дисперсии нормального распределения.
44. Доверительный интервал для коэффициента корреляции.
45. Доверительный интервал для параметра p биномиального распределения.
46. Доверительный интервал для параметра λ распределения Пуассона.
47. Проверка статистических гипотез. Вероятность ошибки 1-ого и 2-ого рода. Уровень значимости критерия и мощность критерия.
48. Одновыборочный t-критерий.
49. Двухвыборочный t-критерий (для независимых и связанных выборок).
50. Двухвыборочный F-критерий.
51. Проверка гипотезы о равенстве параметров биномиальных случайных величин.
52. Проверка гипотезы о равенстве параметров пуассоновских случайных величин.
53. Критерии согласия χ^2 , Колмогорова и Смирнова.
54. Критерии знаков и ранговых знаков.
55. Критерии для проверки гипотезы об отсутствии сдвига (для независимых и связанных выборок).
56. Проверка гипотез о независимости (для двумерного нормального и произвольных распределений).
57. Классификация методов многомерного статистического анализа.
58. Регрессионный анализ.
59. Дисперсионный анализ.
60. Кластерный анализ.

8.3. Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (4 семестр).

Зачёт с оценкой по дисциплине «Теория вероятностей и статистическая обработка результатов эксперимента» проводится в 4 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1, 2 и 3 рабочей программы дисциплины. Билет зачёта с оценкой состоит из 6 вопросов, относящихся к указанным разделам. Ответы на вопросы **зачёта с оценкой** оцениваются из максимальной оценки 40 баллов следующим образом: максимальное количество баллов за первый и второй вопрос – по 6 баллов, с третьего по шестой вопросы по -7 баллов.

Пример билета для **вид контроля из УП**:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) /Травень В.Ф./ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__г	Министерство науки и высшего образования РФ									
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева									
	Кафедра Сколтеха									
	04.03.01 Химия									
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»									
Теория вероятностей и статистическая обработка результатов эксперимента										
Билет № 1										
1. Функция распределения случайной величины, ее свойства. 2. Проверка статистических гипотез. Ошибки первого и второго рода. Критическая область. Область принятия гипотезы. 3. При разрыве бронебойного снаряда крупные осколки составляют 20% от общего числа осколков, средние – 30%, мелкие – 50%. Вероятность того, что крупный осколок пробьет броню $p_1 = 0,8$; для средних и мелких осколков соответственно $p_2 = 0,5$ и $p_3 = 0,2$. Найти вероятность пробивания брони. 4. Плотность распределения вероятностей непрерывной случайной величины ξ имеет вид $f(x) = \begin{cases} c(x + 2), & x \in [1, 5] \\ 0, & x \notin [1, 5] \end{cases}$ Найти параметр c, $M[\xi]$, $D[\xi]$, $F(x)$, $P(-1 < \xi < 3)$, построить графики $F(x)$ и $f(x)$. 5. По заданной выборке <table><tr><td>2,3</td><td>2,4</td><td>2,7</td><td>2,3</td><td>2,5</td><td>2,4</td><td>2,1</td><td>2,3</td><td>2,5</td></tr></table> составить вариационный ряд, построить полигон частот, вычислить выборочную среднюю, выборочную дисперсию, исправленное среднееквадратичное отклонение. 6. Инвестиция №1 рассчитана на $n_1 = 14$ лет, дисперсия ежегодных прибылей $s_1^2 = 15\%^2$. Инвестиция №2 рассчитана на $n_2 = 12$ лет, дисперсия ежегодных прибылей $s_2^2 = 20\%^2$. Предполагается, что распределение ежегодных прибылей на инвестиции подчиняется нормальному закону распределения. Равны ли риски (σ^2) инвестиций №1 и №2? Доверительная вероятность $\gamma = 0,99$.		2,3	2,4	2,7	2,3	2,5	2,4	2,1	2,3	2,5
2,3	2,4	2,7	2,3	2,5	2,4	2,1	2,3	2,5		

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Мешалкин Л.Д. Сборник задач по теории вероятностей. М.: Изд-во МГУ, 1963, 154 с.
2. Мятлев В.Д., Панченко Л.А., Ризниченко Г.Ю., Терехин А.Т. Теория вероятностей и математическая статистика. Математические модели. Москва, Издательский центр «Академия», 2009. – 315 с.
3. В.Д.Мятлев, Л.А.Панченко, А.Т.Терехин «Основы теории вероятностей», Москва, МАКС Пресс, 2002 48 с.
4. В.Д.Мятлев, Л.А.Панченко, А.Т.Терехин «Основы математической статистики», Москва, МАКС Пресс, 2002, 57 с.
5. Мятлев В.Д., Панченко Л.А., Терехин А «Анализ многомерных данных», Москва, МАКС Пресс, 2007, 72 с.

Б. Дополнительная литература

1. Афифи А., Эйзен С. Статистический анализ. Подход с использованием ЭВМ. М.: Мир, 1982, 488 с.
2. Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. 12-е изд. М.: Юрайт, 2005, 479 с.
3. Гнеденко Б.В., Хинчин А.Я. Элементарное введение в теорию вероятностей. 1982. М.: Наука.
4. Колмогоров А.Н. Основные понятия теории вероятностей. М.: Наука, 1974, 119 с.
5. Крамер Г. Математические методы статистики. Москва: Мир, 1975, 648 с.
6. Тутубалин В.Н. Теория вероятностей и случайных процессов. М.: Из-во МГУ, 1992, 400 с.
7. Чжун К.Л., Айтсахлиа Ф. Элементарный курс теории вероятностей. М.: Бином, 2007, 455 с.
8. Шеффе Г. Дисперсионный анализ. М.: Наука, 1980, 512 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации.
- Комплекс обучающих программ.
- Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети Интернет:
-- <http://kvm.muctr.ru/> – сайт кафедры высшей математики.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Теория вероятностей и статистическая обработка результатов эксперимента»* проводятся в форме лекционных, семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Учебные аудитории для проведения лекционных и практических занятий, оборудованные традиционными учебными досками и учебной мебелью; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Учебно-методические пособия, разработанные на кафедре высшей математики, выложены на сайте кафедры <http://kvm.muctr.ru> и на сайте библиотеки РХТУ имени Д.И.Менделеева <https://lib.muctr.ru>.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, принтеры, сканер и копировальный аппарат используются для подготовки раздаточных материалов.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса; раздаточный материал к практическим занятиям по дисциплине, комплекты контрольных и экзаменационных билетов.

Учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

14. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Наименование раздела	<i>Знает:</i> - основные положения теории вероятностей и математической статистики, необходимые для решения прикладных задач; - методологию, методы и приёмы проведения количественного анализа и моделирования поведения технических систем, событий и процессов; - методы теоретического и экспериментального исследования в области решения задач профессиональной деятельности; <i>Умеет:</i> - применять основные методы теории вероятностей и математической статистики для решения профессиональных задач; - решать типовые математические задачи, используемые при принятии технических решений; - строить математические модели прикладных задач и исследовать эти модели, обрабатывать эмпирические и экспериментальные данные; <i>Владеет:</i> - современными методами теории вероятностей и математической статистики для построения математических моделей задач, возникающих в инженерной практике; - навыками применения современного математического инструментария для решения прикладных задач;	Оценка за контрольную работу №1 (4 семестр) Оценка за <i>зачёт с оценкой</i> (4 семестр)
Раздел 2. Наименование раздела	<i>Знает:</i> - основные положения теории вероятностей и математической статистики, необходимые для решения прикладных задач; - методологию, методы и приёмы проведения количественного анализа и моделирования поведения технических систем, событий и	Оценка за контрольную работу №2 (4 семестр) Оценка за <i>зачёт с оценкой</i> (4 семестр)

	процессов; - методы теоретического и экспериментального исследования в области решения задач профессиональной деятельности; <i>Умеет:</i> - применять основные методы теории вероятностей и математической статистики для решения профессиональных задач; - решать типовые математические задачи, используемые при принятии технических решений; - строить математические модели прикладных задач и исследовать эти модели, обрабатывать эмпирические и экспериментальные данные; <i>Владеет:</i> - современными методами теории вероятностей и математической статистики для построения математических моделей задач, возникающих в инженерной практике; - навыками применения современного математического инструментария для решения прикладных задач;	
Раздел 3. Наименование раздела	<i>Знает:</i> - основные положения теории вероятностей и математической статистики, необходимые для решения прикладных задач; - методологию, методы и приёмы проведения количественного анализа и моделирования поведения технических систем, событий и процессов; - методы теоретического и экспериментального исследования в области решения задач профессиональной деятельности; <i>Умеет:</i> - применять основные методы теории вероятностей и математической статистики для решения профессиональных задач; - решать типовые математические задачи, используемые при принятии технических решений; - строить математические модели прикладных задач и исследовать эти	Оценка за зачёт с оценкой (4 семестр)

	модели, обрабатывать эмпирические и экспериментальные данные; <i>Владеет:</i> - современными методами теории вероятностей и математической статистики для построения математических моделей задач, возникающих в инженерной практике; - навыками применения современного математического инструментария для решения прикладных задач;	

15. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

« _____ »

основной образовательной программы

« _____ »

код и наименование направления подготовки (специальности)

« _____ »

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуреньков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Физика»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры Сколтех В.Н.Аксёновым.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтех РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1 ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой физики РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение курса в течение четырех семестров.

Дисциплина «Физика» относится к базовой части обязательных дисциплин учебного плана и рассчитана на изучение в 4 семестрах. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в рамках школьной программы по физике и математике.

Цель дисциплины – приобретение студентами знаний по основным разделам физики и умению применять их в других естественнонаучных дисциплинах.

Задачи дисциплины –

- формирование представлений об основных физических законах природы и методах теоретических исследований различных физических явлений
- получение представления о современных экспериментальных методах исследования.

Дисциплина «Физика» преподается в 1, 2, 3 и 4 семестрах. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2 ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **общепрофессиональных компетенций и индикаторов их достижения:**

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Представление результатов профессиональной деятельности	ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.	ОПК-4.1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности; ОПК-4.3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- физические основы механики, физики колебаний и волн, электричества и магнетизма, электродинамики, статистической физики и термодинамики, квантовой физики;

- смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости;
- связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; основные методы решения задач по описанию физических явлений;
- методы обработки результатов физического эксперимента.

Уметь:

- применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач;
- проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы;
- анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики;
- определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений;
- представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий.

Владеть:

- навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования;
- навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.

3 ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего		Семестр							
			1		2		3		4	
	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.	ЗЕ	Акад. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	14	504	3	108	4	144	3	108	4	144
Контактная работа – аудиторные занятия:	7,12	256	1,78	64	1,78	64	1,78	64	1,78	64
Лекции	3,56	128	0,89	32	0,89	32	0,89	32	0,89	32
Практические занятия (ПЗ)	3,56	128	0,89	32	0,89	32	0,89	32	0,89	32
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Самостоятельная работа	5,88	212	1,22	44	2,22	80	1,22	44	1,22	44
Контактная самостоятельная работа	5,88	1,2	1,22	0,4	1,22	0,4	1,22	0,4	1,22	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		210,8		43,6		43,6		43,6		44
Виды контроля:										
Зачет с оценкой	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Экзамен	1	36	-	-	-	-	-	-	1	36
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	-	-	-	-	-	-	1	0,4
Подготовка к экзамену.		35,6	-	-		-		35,6		
Вид итогового контроля:			Зачет с оценкой		Зачет с оценкой		Зачет с оценкой		Экзамен	

Вид учебной работы	Всего		Семестр							
			1		2		3		4	
	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.	ЗЕ	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	18	486	3	81	4	108	3	81	4	108
Контактная работа – аудиторные занятия:	7,12	288	1,78	48	1,78	72	1,78	48	1,78	72
Лекции	3,56	96	0,89	24	0,89	24	0,89	24	0,89	24
Практические занятия (ПЗ)	3,56	96	0,89	24	0,89	24	0,89	24	0,89	24
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Самостоятельна я работа	5,88	159	1,22	33	2,22	60	1,22	33	1,22	33
Контактная самостоятельная работа	5,88	0,9	1,22	0,3	1,22	0,3	1,22	0,3	1,22	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		158,4		32,7		32,7		32,7		33
Виды контроля:										
Зачет с оценкой	-	-	+	+	-	-	+	+	-	-
Экзамен	1	27	-	-	-	-	-	-	1	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,3	-	-	-	-	-	-	1	0,3
Подготовка к экзамену.		26,7		-		-		-		26,7
Вид итогового контроля:			Зачет с оценкой		Зачет с оценкой		Зачет с оценкой		Экзамен	

4 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лек- ции	Прак. Зан.	Лаб. рабо- ты	Сам. работа
	1 СЕМЕСТР					
1	Раздел 1. Введение в механику.	54	16	16	-	22
1.1	Кинематика: основные понятия. Проекция векторов.	14	4	4	-	6
1.2	Основные законы механики: законы Ньютона, законы сохранения импульса и энергии.	14	4	4	-	6
1.3	Работа, энергия, мощность: простейшие задачи.	13	4	4	-	5
1.4	Колебания и волны: основные характеристики колебательного движения.	13	4	4	-	5
2	Раздел 2. Введение в термодинамику и молекулярно-кинетическую теорию (МКТ).	54	16	16	-	22
2.1	Основные положения МКТ	22	8	8	-	6
2.2	Термодинамика: законы и их приложения.	16	4	4	-	8
2.3	Циклы, КПД, решение задачи по первому началу термодинамики	16	4	4	-	8
		108	32	32		44
	Зачет с оценкой	-				
	Всего	108				
	2 СЕМЕСТР					
3	Раздел 3. Физические основы механики.	72	16	16	-	40
3.1	Предмет кинематики. Перемещение, скорость, ускорение. Кинематические характеристики вращательного движения.	18	4	4	-	10
3.2	Законы Ньютона. Закон всемирного тяготения. Закон всемирного тяготения. Движение тела переменной массы. Уравнения Мещерского. Формула Циолковского.	18	4	4	-	10
3.3	Упругий и неупругий удары шаров. Момент инерции материальной точки и твердого тела.	18	4	4	-	10
3.4	Кинематика гармонических колебаний. Дифференциальное уравнение гармонических колебаний. Понятие о затухающих и вынужденных колебаниях. Волновое движение. Волны продольные и поперечные.	18	4	4	-	10

4	Раздел 4. Основы молекулярной физики.	54	12	12	-	30
4.1	Элементы термодинамики и физической кинетики. Идеальный газ. Распределение Больцмана и его общезначимый смысл. Реальный газ. Уравнение Ван-дер-Ваальса.	18	4	4	-	10
4.2	Термодинамический метод в физике. Равновесные состояния. Начала термодинамики. Циклы. Энтропия и ее статистическое толкование.	18	4	4	-	10
4.3	Явление переноса. Диффузия. Закон Фика. Теплопроводность. Закон Фурье. Внутреннее трение (вязкость). Закон Ньютона.	18	4	4	-	10
5	Раздел 5. Электростатика и постоянный электрический ток	18	4	4	-	10
5.1	Закон Кулона. Теорема Остроградского-Гаусса. Диполь. Диэлектрики в электростатическом поле.	18	4	4	-	10
		144	32	32	-	80
	Зачёт с оценкой	-				
	Всего	144				
	3 СЕМЕСТР					
6	Раздел 6. Электромагнетизм.	26	8	8	-	10
6.1	Закон Ампера. Закон Био-Савара-Лапласа. Сила Лоренца	18	4	4	-	5
6.2	Магнетики. Электромагнитная индукция. Уравнение Максвелла.	18	4	4	-	5
7	Раздел 7. Оптика.	41	12	12	-	17
7.1	Интерференция волн. Дифракция волн. Поляризация волн.	13	4	4	-	5
7.2	Тепловое излучение. Закон Кирхгофа. Гипотеза Планка. Квантовое объяснение теплового излучения. Эффект Комптона.	14	4	4	-	6
7.3	Ядерная модель атома. Постулаты Бора. Атом водорода по Бору	14	4	4	-	6
8	Раздел 8. Элементы квантовой физики	41	12	12	-	17
8.1	Гипотеза де Бройля. Волновое уравнение Шредингера для стационарных состояний. Опыты Штерна-Герлаха.	14	4	4	-	6
8.2	Многоэлектронный атом. Эффект Зеемана. Принцип Паули. Квантовые статистические распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака. Фононы. Законы Дебая и Эйнштейна.	14	4	4	-	6

8.3	Характеристики ядра: заряд, масса, энергия связи нуклонов. Ядерные реакции. Фундаментальные взаимодействия и основные классы элементарных частиц.	13	4	4	-	5
		108	32	32	-	44
	Зачёт с оценкой	-				
	Всего	108				
	4 СЕМЕСТР					
9	Раздел 9. Элементы квантовой статистики.	39	12	12	-	15
9.1	Элементы квантовой статистики. Квантовая система из одинаковых частиц. Принцип тождественности одинаковых частиц. Симметричные и несимметричные волновые функции, описывающие состояния тождественных микрочастиц.	26	8	8	-	10
9.2	Бозоны и фермионы. Принцип Паули. Квантовые статистические распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми- Дирака. Вырожденный электронный газ в кристаллах (металлы).	13	4	4	-	5
10	Раздел 10. Металлы, диэлектрики и полупроводники с точки зрения зонной теории.	13	4	4	-	5
10.1	Энергетические зоны: статистика Ферми-Дирака, энергия Ферми. Электрон в периодическом поле кристалла: эффективная масса электрона.	13	4	4	-	5
11	Раздел 11. Элементы физики твёрдого тела.	56	16	16	-	24
11.1	Физика твёрдого тела (ФТТ): определение, связь с другими дисциплинами, объекты изучения, круг решаемых задач. Связь с кристаллографией, кристаллофизикой и кристаллохимией.	24	8	8	-	8
11.2	Конденсированное состояние. Подход к описанию твёрдых тел. Структура кристаллов. Симметрия и физические свойства кристаллов.	16	4	4	-	8

11.3	Типы кристаллических структур (общая характеристика). Плотные упаковки: кубическая и гексагональная (на качественном уровне). Понятие о сверхпроводимости (квантовые представления на качественном уровне).	16	4	4	-	8
		108	32	32		44
	Экзамен	36				
	Всего	144				
	ИТОГО	504				

4.2 Содержание разделов дисциплины

Семестр 1.

Раздел 1. Введение в механику.

1.1. Роль курса «Физика» в процессе химико- технологического ВУЗа. Основы механики. Классическая механика Ньютона и граница её применимости. Кинематика. Механическое движение. Система отсчёта. Материальная точка. Траектория. Перемещение и путь. Скорость и ускорение. Равномерное и равнопеременное прямолинейное движение. Относительность движения. Сложение скоростей. Графики зависимости кинематических характеристик от времени при равномерном и равнопеременном движении. Свободное падение тел. Ускорение свободного падения. Примеры.

1.2. Кинематика вращательного движения. Характеристики вращательного движения. Основы динамики. Первый закон Ньютона. Инерциальные системы отсчета. Принцип относительности Галилея. Сила. Второй закон Ньютона. Момент силы. Условие равновесия. Центр масс системы. Третий закон Ньютона. Закон Гука. Сила трения. Трение покоя. Трение скольжения. Закон всемирного тяготения. Силы тяжести, вес, примеры.

1.3. Законы сохранения. Импульс материальной точки. Второй закон Ньютона в импульсной форме. Закон сохранения импульса. Работа силы, мощность. Энергия. Виды механической энергии. Консервативные системы. Закон сохранения в механике. Закон сохранения полной энергии. Примеры.

1.4. Механические колебания и волны. Гармонический колебания. Амплитуда, период, частота. Пружинный маятник, математический маятник. Закон сохранения энергии при колебательном движении. Волновая поверхность. Фронт волны. Поперечные и продольные волны. Примеры.

Раздел 2. Введение в молекулярную физику и термодинамику.

2.1. Основы МКТ (молекулярно-кинетической теории). Опытное обоснование положений МКТ. Броуновское движение. Взаимодействие молекул. Число Авогадро. Идеальный газ. Основное уравнение МКТ. Средняя квадратичная скорость движения молекул. Температура. Абсолютная температура. Примеры.

2.2 Уравнение Менделеева-Клапейрона. Универсальная газовая постоянная. Изопроцессы. Графики изопроцессов в координатах p - V , V - T , p - T . Закон Дальтона. Примеры.

2.3. Испарение и конденсация. Насыщенные и ненасыщенные пары. Кипение жидкости. Влажность воздуха. Кристаллические и аморфные тела. Основы термодинамики. Внутренняя энергия. Количество теплоты. Теплоемкость вещества. Работа в термодинамике.

2.4. Первый закон термодинамики. Адиабатный процесс. Необратимость процессов в природе. Второй закон термодинамики. КПД тепловых двигателей. Идеальная тепловая машина.

Семестр 2.

Раздел 3. Физические основы механики.

3.1. Предмет физики. Методы физического исследования: опыт, гипотеза, эксперимент, теория. Предмет кинематики. Перемещение, скорость, ускорение. Кинематические характеристики вращательного движения.

3.2. Законы Ньютона. Закон всемирного тяготения. Закон всемирного тяготения. Движение тела переменной массы. Уравнения Мещерского. Формула Циолковского.

3.3. Упругий и неупругий удары шаров. Момент инерции материальной точки и твердого тела.

3.4. Кинематика гармонических колебаний. Дифференциальное уравнение гармонических колебаний. Понятие о затухающих и вынужденных колебаниях. Волновое движение. Волны продольные и поперечные.

Раздел 4. Основы молекулярной физики.

4.1. Элементы термодинамики и физической кинетики. Идеальный газ. Распределение Больцмана и его общезначимый смысл. Реальный газ. Уравнение Ван-дер-Ваальса.

4.2. Термодинамический метод в физике. Равновесные состояния. Начала термодинамики. Циклы. Энтропия и ее статистическое толкование.

4.3. Явление переноса. Диффузия. Закон Фика. Теплопроводность. Закон Фурье. Внутреннее трение (вязкость). Закон Ньютона.

Раздел 5. Электростатика и постоянный электрический ток.

5.1. Закон Кулона. Теорема Остроградского-Гаусса. Диполь. Диэлектрики в электростатическом поле

Семестр 3.

Раздел 6. Электромагнетизм.

6.1. Закон Ампера. Закон Био-Савара-Лапласа. Сила Лоренца.

6.2. Магнетики. Электромагнитная индукция. Уравнение Максвелла.

Раздел 7. Оптика.

7.1. Интерференция волн. Дифракция волн. Поляризация волн.

7.2. Тепловое излучение. Закон Кирхгофа. Гипотеза Планка. Квантовое объяснение теплового излучения. Эффект Комптона.

7.3. Ядерная модель атома. Постулаты Бора. Атом водорода по Бору.

Раздел 8. Элементы квантовой физики.

8.1. Гипотеза де Бройля. Волновое уравнение Шредингера для стационарных состояний. Опыты Штерна-Герлаха.

8.2. Многоэлектронный атом. Эффект Зеемана. Принцип Паули. Квантовые статистические распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака. Фононы. Законы Дебая и Эйнштейна.

Семестр 4.

Раздел 9. Элементы квантовой статистики.

9.1. Элементы квантовой статистики. Квантовая система из одинаковых частиц. Принцип тождественности одинаковых частиц. Симметричные и несимметричные волновые функции, описывающие состояния тождественных микрочастиц.

9.2. Бозоны и фермионы. Принцип Паули. Квантовые статистические распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака. Вырожденный электронный газ в кристаллах (металлы).

Раздел 10. Металлы, диэлектрики и полупроводники с точки зрения зонной теории.

10.1. Энергетические зоны: статистика Ферми-Дирака, энергия Ферми. Электрон в периодическом поле кристалла: эффективная масса электрона.

Раздел 11. Элементы физики твердого тела.

11.1. Физика твёрдого тела (ФТТ): определение, связь с другими дисциплинами, объекты изучения, круг решаемых задач. Связь с кристаллографией, кристаллофизикой и кристаллохимией.

11.2. Конденсированное состояние. Подход к описанию твёрдых тел. Структура кристаллов. Симметрия и физические свойства кристаллов.

11.3. Типы кристаллических структур (общая характеристика). Плотные упаковки: кубическая и гексагональная (на качественном уровне). Понятие о сверхпроводимости (квантовые представления на качественном уровне).

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

[illegible]

[illegible]

6 ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1 Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
		1 СЕМЕСТР	
1	1	Основы механики. Классическая механика Ньютона и граница её применимости. Кинематика. Механическое движение. Система отсчёта. Материальная точка. Траектория. Перемещение и путь. Скорость и ускорение. Равномерное и равнопеременное прямолинейное движение. Относительность движения. Сложение скоростей. Графики зависимости кинематических характеристик от времени при равномерном и равнопеременном движении. Свободное падение тел. Ускорение свободного падения. Примеры.	4
2	1	Кинематика вращательного движения. Характеристики вращательного движения. Основы динамики. Первый закон Ньютона. Инерциальные системы отсчета. Принцип относительности Галилея. Сила. Второй закон Ньютона. Момент силы. Условие равновесия. Центр масс системы. Третий закон Ньютона. Закон Гука. Сила трения. Трение покоя. Трение скольжения. Закон всемирного тяготения. Силы тяжести, вес, примеры.	4
3	1	Законы сохранения. Импульс материальной точки. Второй закон Ньютона в импульсной форме. Закон сохранения импульса. Работа силы, мощность. Энергия. Виды механической энергии. Консервативные системы. Закон сохранения в механике. Закон сохранения полной энергии. Примеры.	4
4	1	Механические колебания и волны. Гармонический колебания. Амплитуда, период, частота. Пружинный маятник, математический маятник. Закон сохранения энергии при колебательном движении. Волновая поверхность. Фронт волны. Поперечные и продольные волны. Примеры.	4
5	2	Основы МКТ. Опытное обоснование положений МКТ. Броуновское движение. Взаимодействие молекул. Число Авогадро. Идеальный газ. Основное уравнение МКТ. Средняя квадратичная скорость движения молекул. Температура. Абсолютная температура. Примеры.	4
6	2	Уравнение Менделеева-Клапейрона. Универсальная газовая постоянная. Изопроцессы. Графики изопроцессов в координатах p - V , V - T , p - T . Закон Дальтона. Примеры.	4
7	2	Испарение и конденсация. Насыщенные и ненасыщенные пары. Кипение жидкости. Влажность воздуха. Кристаллические и аморфные тела. Основы термодинамики. Внутренняя энергия. Количество теплоты. Теплоемкость вещества. Работа в термодинамике.	4

8	2	Первый закон термодинамики. Адиабатный процесс. Необратимость процессов в природе. Второй закон термодинамики. КПД тепловых двигателей. Идеальная тепловая машина.	4
		2 СЕМЕСТР	
9	3	Некоторые сведения о системах единиц. Порядок решения физических задач. Кинематика. Векторная и координатная формы описания движения материальной точки. Кинематические уравнения движения. Криволинейное движение. Нормальное и тангенциальное ускорения. Кинематические характеристики вращательного движения.	6
10	3	Динамика. Второй закон Ньютона. Движение тела под действием временной силы. Движение тела переменной массы. Закон сохранения импульса. Неупругое и упругое столкновение шаров. Закон всемирного тяготения. Закон Гука. Силы трения. Работа постоянной и переменной силы. Кинетическая и потенциальная энергии. Закон сохранения энергии в механике.	6
11	3	Динамика вращательного движения. Основной закон динамики вращательного движения. Момент инерции. Теорема Штейнера. Закон сохранения импульса. Кинетическая энергия тела, вращающегося вокруг неподвижной оси.	8
12	3	Кинематика гармонических колебаний. Динамика гармонических колебаний. Физический маятник. Затухающие и вынужденные колебания.	4
13	4	Основное уравнение молекулярно-кинетической теории для идеального газа. Распределения Больцмана. Барометрическая формула. Распределение Максвелла.	4
14	4	Первое начало термодинамики и применение его к изопроцессам. Теплоемкость идеального газа. Адиабатный процесс. Второе начало термодинамики. Цикл Карно. Энтропия.	8
15	4	Явление переноса. Диффузия. Теплопроводность. Вязкость. Реальный газ. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Критическое состояние вещества. Идеальная жидкость. Уравнение неразрывности. Закон Бернулли. Формула Торричелли.	4
16	5	Взаимодействие точечных зарядов. Закон Кулона. Напряженность и потенциал электростатического поля. Принцип суперпозиции электростатических полей. Связь потенциала с напряженностью. Теорема Остроградского-Гаусса и применение ее к расчету электрических полей, обладающих симметрией.	8
		3 СЕМЕСТР	
1	6	Магнитное поле и его характеристики. Применение закона Био-Савара-Лапласа и теоремы о циркуляции к расчету магнитных полей.	4
2	6	Закон Ампера. Магнитный момент контура с током. Контур с током в магнитном поле.	4

3	6	Сила Лоренца. Движение заряженных частиц в магнитном поле.	4
4	6	Магнитный поток. Работа сил магнитного поля. Закон электромагнитной индукции. Самоиндукция. Индуктивность.	4
5	7	Интерференция света. Интерференция в тонких пленках. Кольца Ньютона. Интерферометры.	2
6	7	Дифракция света. Метод зон Френеля. Дифракция Фраунгофера от одной щели. Дифракционная решетка.	2
7	7	Поляризация света. Закон Брюстера. Закон Малюса.	2
8	7	Тепловое излучение. Спектральные характеристики теплового излучения. Закон Стефана-Больцмана. Закон смещения Вина. Распределение энергии в спектре излучения абсолютно черного тела.	2
9	7	Внешний фотоэффект. Эффект Комптона. Тормозное излучение. Атом водорода по Бору. Волновые свойства частиц. Дифракция электронов. Соотношения неопределенностей.	2
		4 СЕМЕСТР	
1	8	Микрочастица в бесконечно глубокой, прямоугольной потенциальной яме. Потенциальная ступень. Потенциальный барьер.	10
2	8	Многэлектронный атом. Векторная модель атома. Атомный терм. Мультиплетность. Магнитный момент атома. Магнитный момент атома. Атом в магнитном поле. Опыты Штерна-Герлаха.	12
3	9	Распределение Ферми-Дирака. Вырожденный электронный газ в кристаллах. Энергия Ферми. Температура Ферми.	12
4	9	Квантовая теория теплоемкости твердых тел по Эйнштейну и Дебаю. Характеристические температуры. Предельный закон Дебая. Фононы. Элементы ядерной физики. Дозиметрия.	12
5	10	Квантовый гармонический и ангармонический осциллятор.	4
6	10	Строение атома. Атом водорода: расчёт распределение плотности вероятности электрона в атоме. Распределение Ферми-Дирака. Вырожденный электронный газ в кристаллах. Энергия Ферми. Температура Ферми.	4
7	11	Квантовая теория теплоемкостей твёрдых тел по Эйнштейну и Дебаю. Характеристические температуры. Предельный закон Дебая. Фононы.	8
8	11	Геометрическая кристаллография. Основы кристаллохимии.	8
9	11	Вычисление коэффициента заполнения для а) простой куб ячейки; б) для ОЦК ячейки. Вычисление коэффициента заполнения ГЦК ячейки структуры алмаза.	4
10	11	Расчёт размеров пустот в плотноупакованных структурах. Расчёт энергии ионного кристалла (пример	4

		структура NaCl).	
11	11	Расчет радиуса шара для случая плотноупакованной структуры, который можно поместить в тетраэдрическую пустоту.	4
12	11	Исследование, каким образом рассчитывается энергия решётки кристалла NaCl для NA пар ионов.	4

6.2 Лабораторные занятия.

Лабораторный практикум по дисциплине «Физика» не предусмотрен

7 САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике курса;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче зачета с оценкой (1- 3 семестры), к зачету (4 семестр) по курсу.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в учебной программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8 ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине в 1 семестре складывается из оценок за выполнение двух контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) по 30 баллов за каждую и итогового контроля в форме **зачёта с оценкой** (максимальная оценка 40 баллов). Совокупная оценка по дисциплине во 2 семестре складывается из оценок за выполнение двух контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) по 30 баллов за каждую и итогового контроля в форме **зачёта с оценкой** (максимальная оценка 40 баллов). Совокупная оценка в 3 семестре складывается из оценок за выполнение четырёх контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) по 15 баллов за каждую и итогового контроля в форме **зачёта с оценкой** (максимальная оценка 40 баллов). Совокупная оценка в 4 семестре складывается из оценок за выполнение двух контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) по 30 баллов за каждую и итогового контроля в форме **экзамена** (максимальная оценка 40 баллов)

8.1 Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2 Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Примеры заданий к контрольной работе № 1 (семестр 1). Контрольная работа содержит 2 задачи, по 15 баллов максимум за каждую.

1. Тело брошено под некоторым углом к горизонту. Найти этот угол, если горизонтальная дальность полета в 4 раза больше максимальной высоты траектории.
2. Шар массой 10 кг, движущийся со скоростью 4 м/с, сталкивается с шаром массой 4 кг, скорость которого равна 12 м/с. Считая удар прямым, неупругим, найти скорость шаров после удара в двух случаях: 1) малый шар нагоняет большой шар, движущийся в том же направлении; 2) шары движутся навстречу друг другу.
3. Снаряд массой 10 кг обладал скоростью 200 м/с в верхней точке траектории. В этой точке он разорвался на две части. Меньшая массой 3 кг получила скорость 400 м/с в прежнем направлении. Найти скорость второй, большей части после разрыва.

Примеры вопросов к контрольной работе № 2 (1 семестр). Контрольная работа содержит 2 задачи, по 15 баллов максимум за каждую.

1. На какой высоте над поверхностью Земли атмосферное давление вдвое меньше, чем на ее поверхности? Считать, что температура T воздуха равна 290 К и не изменяется с высотой.
2. Газ, занимавший объем 12 л под давлением 100 кПа, был изобарно нагрет от температуры 300 К до 400 К. Определить работу A расширения газа.
3. Гелий массой 1 г был нагрет на 100 К при постоянном давлении p . Определить: 1) количество теплоты, переданное газу; 2) работу расширения; 3) приращение внутренней энергии газа.
4. Азот массой 5 кг, нагретый на 150 К, сохранил неизменный объем. Найти: 1) количество теплоты, сообщенное газу; 2) изменение внутренней энергии; 3) совершенную газом работу.
5. Водород массой 4 г был нагрет на 10 К при постоянном давлении. Определить работу A расширения газа.
6. Барометр в кабине летящего вертолета показывает давление 90 кПа. На какой высоте вертолет, если на взлетной площадке барометр показывал давление 100 кПа? Считать, что температура воздуха равна 290 К и не изменяется с высотой.

Примеры заданий к контрольной работе № 3 (2 семестр). Контрольная работа содержит 2 задачи, по 15 баллов максимум за каждую.

1. Однородный стержень массой 0,1 кг может свободно вращаться относительно горизонтальной оси, проходящей через точку O , расположенной на расстоянии одной трети от верхнего конца стержня. В нижнюю точку стержня попадает горизонтально летящий шарик и прилипает к стержню. Скорость шарика 10 м/с, его масса 2 г. Определить линейную скорость точки, принадлежащей верхнему концу стержня в начальный момент времени.
2. Определить период гармонических колебаний физического маятника, состоящего из двух шариков массами 5 кг и 10 кг, закрепленных на его концах. Горизонтальная ось проходит через точку на стержне, отстоящую от его верхнего конца на одну четверть. Шары можно считать материальными точками.
3. Определить циклическую частоту гармонических колебаний физического маятника, состоящего из однородного плоского диска. Масса стержня 1 кг, масса диска 2 кг. Горизонтальная ось проходит через точку соединения стержня и диска перпендикулярно плоскости диска.
4. Определить момент инерции тонкого однородного стержня длиной 30 см и массой 100 г относительно оси, перпендикулярной стержню и проходящей через: 1) его конец; 2) его середину; 3) точку, отстоящую от конца стержня на $1/3$ его длины.

5. Определить частоту гармонических колебаний физического маятника, состоящего из невесомого стержня длины 0,2 м и двух шариков массами 30 г и 50 г, укрепленных на концах стержня. Горизонтальная ось проходит через середину стержня. Шарiki можно рассматривать как материальные точки.
6. Однородный диск массой 1 кг может свободно вращаться вокруг горизонтальной оси, перпендикулярной плоскости диска и проходящей через его центр. В точку на образующей диска попадает горизонтально летящий со скоростью 10 м/с шарик прилипает к его поверхности. Масса шарика 5 г. Определить угловую скорость вращения диска в начальный момент времени. Радиус диска 20 см.

Примеры вопросов к контрольной работе № 4 (2 семестр). Контрольная работа содержит 2 задачи, по 15 баллов максимум за каждую.

1. Определить вероятность того, что скорость данной молекулы идеального газа отличается от значения наиболее вероятной скорости не более, чем на 2%. На графике распределения скорости заштриховать площадь, соответствующему найденному значению вероятности.
2. Определить вероятность того, что скорость данной молекулы идеального газа отличается от значения $1/3$ наиболее вероятной скорости не более, чем на 2 %.
3. Определить вероятность того, что скорость данной молекулы лежит в интервале значений от 0 до $0,02$ средней квадратичной скорости. На графике распределения вероятности скорости заштриховать площадь, соответствующему найденному значению вероятности.
4. Определить долю молекул идеального газа, кинетические энергии которых лежат в интервале значений от 0 до $0,02$ кТ. На графике распределения вероятности энергии заштриховать площадь, соответствующую найденному значению доли молекул.
5. Определить вероятность того, что скорость данной молекулы идеального газа отличается от значения $0,5$ наиболее вероятной скорости не более, чем на 1 %.
6. Найти среднее значение энергии молекулы массой m при значении температуры T .

Примеры вопросов к контрольной работе № 5 (3 семестр). Контрольная содержит 2 задачи. 1 задача-7 баллов, 2 задача 8 баллов.

1. Прямой металлический стержень диаметром 5 см и длиной 4 м несет равномерно распределенный по его поверхности заряд 500 нКл. Определить напряженность E поля в точке, находящейся на расстоянии 1 см от его поверхности против середины стержня.
2. Два точечных заряда 2 нКл и -1 нКл находятся на расстоянии 3 см друг от друга. Найти положение точки на прямой, проходящей через эти заряды, напряженность E поля в которой равна нулю.
3. На металлической сфере радиусом 10 см находится заряд 1 нКл. Определить напряженность электрического поля в следующих точках: 1) на расстоянии 8 см от центра сферы; 2) на ее поверхности; 3) на расстоянии 15 см от центра сферы. Построить график зависимости напряженности поля от расстояния от центра сферы.
4. Расстояние между зарядами +3 нКл и -3 нКл диполя равно 12 см. Найти напряженность и потенциал поля, создаваемого диполем в точке, удаленной на 8 см как от первого, так и от второго заряда.
5. Тонкое кольцо радиуса 8 см несет заряд, равномерно распределенный с линейной плотностью 10 нКл/м. Какова напряженность электрического поля в точке, равноудаленной от всех точек кольца на расстояние 10 см?
6. Очень длинная тонкая прямая проволока несет заряд, равномерно распределенный по всей ее длине. Вычислить линейную плотность заряда, если напряженность поля на расстоянии 0,5 м от проволоки против ее середины равна 200 В/м.
7. Бесконечная плоскость несет заряд, равномерно распределенный с поверхностной плотностью 1 мКл/м^2 . На некотором расстоянии от плоскости параллельно ей

расположен круг радиусом 10 см. Вычислить поток вектора напряженности через этот круг.

8. Диполь с электрическим моментом $20 \text{ нКл}\cdot\text{м}$ находится в однородном электрическом поле напряженностью 50 кВ/м . Вектор электрического момента составляет угол 60° с линиями поля. Какова потенциальная энергия диполя?

9. Диполь с электрическим моментом $200 \text{ мкКл}\cdot\text{м}$ свободно устанавливается в однородном электрическом поле напряженностью 150 кВ/м . Вычислить работу A , необходимую для того, чтобы повернуть диполь на угол 180° градусов.

10. Диполь с электрическим моментом $100 \text{ мкКл}\cdot\text{м}$ свободно установился в однородном электрическом поле напряженностью $E=10 \text{ кВ/м}$. Определить изменение потенциальной энергии диполя при повороте его на угол 60° градусов.

Примеры вопросов к контрольной работе № 6 (3 семестр). Контрольная содержит 2 задачи. 1 задача-7 баллов, 2 задача 8 баллов.

1. Найти магнитную индукцию в центре кольца с током 10 А , радиус кольца равен 5 см .
2. Напряженность магнитного поля в центре кругового витка радиусом 8 см равна 30 А/м . Определить напряженность поля, создаваемого витком в точке, лежащей на оси витка на расстоянии 6 см от его центра.

3. По прямому бесконечно длинному проводу течет ток 50 А . Определить индукцию B в точке, удаленной на расстояние 5 см от проводника.

4. Два длинных параллельных провода находятся на расстоянии 5 см один от другого. По проводам текут одинаковые токи 10 А в противоположных направлениях. Найти напряженность магнитного поля в точке, находящейся на расстоянии 2 см от одного и 3 см от другого провода.

5. По двум бесконечно длинным прямым проводам, скрещенным под прямым углом, текут токи 30 А и 40 А . Расстояние между проводами 20 см . Определить магнитную индукцию в точке, одинаково удаленной от обоих проводов на расстояние 20 см .

6. Квадратная проволочная рамка с длинным прямым проводом расположена в одной плоскости так, что две ее стороны параллельны проводу. По рамке и проводу текут одинаковые токи 1 кА . Определить силу, действующую на рамку, если ближайшая к проводу сторона рамки находится на расстоянии, равном ее длине.

7. Тонкий провод в виде дуги, составляющей две трети кольца радиусом 15 см , находится в однородном магнитном поле 20 мТл . По проводу течет ток 30 А . Плоскость, в которой лежит дуга, перпендикулярна линиям магнитной индукции, и подводящие провода находятся вне поля. Определить силу, действующую на провод.

8. Двухпроводная линия состоит из длинных параллельных прямых проводов, находящихся на расстоянии 4 мм друг от друга. По проводам текут одинаковые токи 50 А . Определить силу взаимодействия токов, приходящуюся на единицу длины провода.

9. Напряженность магнитного поля в центре кругового витка равна 200 А/м . Магнитный момент витка равен $1 \text{ А}\cdot\text{м}^2$. Вычислить силу тока в витке и радиус витка.

Раздел 5. Примеры вопросов к контрольной работе № 7 (3 семестр). Максимальная оценка – 6 баллов. Контрольная содержит 2 задачи, по 3 балла за задачу.

1. На пути монохроматического света с длиной волны $0,6 \text{ мкм}$ находится плоскопараллельная стеклянная пластинка толщиной $0,1 \text{ мм}$. Свет падает на пластинку нормально. На какой угол следует повернуть пластину, чтобы оптическая длина пути изменилась на половину длины волны?

2. Расстояние между двумя когерентными источниками света равно $0,1 \text{ мм}$ при длине волны $0,5 \text{ мкм}$. Расстояние между интерференционными полосами на экране в средней части интерференционной картины равно 1 см . Определить расстояние от источников до экрана.

3. В опыте Юнга расстояние между щелями равно 0,8 мм, длина волны 640 нм. На каком расстоянии от щелей следует расположить экран, чтобы ширина интерференционной полосы оказалась равной 2 мм?
4. В опыте с зеркалами Френеля расстояние между мнимыми изображениями источника света равно 0,5 мм, расстояние от них до экрана равно 3 м. Длина волны 0,6 мкм. Определить ширину полос интерференции на экране.
5. На мыльную пленку (показатель преломления 1,3), находящуюся в воздухе, падает нормально пучок лучей белого света. При какой наименьшей толщине пленки отраженный свет с длиной волны 0,55 мкм окажется максимально усиленным в результате интерференции?
6. Вычислить радиус пятой зоны Френеля для плоского волнового фронта (длина волны 0,5 мкм), если построение делается для точки наблюдения, находящейся на расстоянии 1 м от фронта волны.
7. Угол Брюстера при падении света из воздуха на кристалл каменной соли равен 57 градусов. Определить скорость света в этом кристалле.
8. Пучок естественного света падает на стеклянную (показатель преломления 1,6) призму. Определить двугранный угол призмы, если отраженный пучок максимально поляризован.

Примеры вопросов к контрольной работе № 8 (3 семестр). Контрольная содержит 2 задачи. 1 задача-7 баллов, 2 задача 8 баллов.

1. Определить энергию, излучаемую за время 1 минута из смотрового окошка площадью 8 см² плавильной печи, если ее температура 1200 К. Считать, что печь излучает как абсолютно черное тело.
2. Определить температуру абсолютно черного тела, при которой максимум спектральной плотности энергетической светимости приходится на красную границу видимого спектра (длина волны 750 нм).
3. Определить работу выхода электронов из натрия, если красная граница фотоэффекта 500 нм.
4. На поверхность лития падает монохроматический свет с длиной волны 310 нм. Чтобы прекратить эмиссию электронов, нужно приложить задерживающую разность потенциалов не менее 1,7 В. Определить работу выхода.
5. Определить давление солнечного излучения на зачерненную пластинку, расположенную перпендикулярно солнечным лучам и находящуюся вне земной атмосферы на среднем расстоянии от Земли до Солнца.
6. Определить максимальное изменение длины волны при комптоновском рассеянии: 1) на свободных электронах; 2) на свободных протонах.

Примеры вопросов к контрольной работе № 9 (4 семестр).

Контрольная работа содержит 1 задачу -30 баллов.

1. Вычислить удельные теплоемкости с кристаллов алюминия и меди по классической теории теплоемкости.
2. Определить относительную погрешность, которая будет допущена, если при вычислении теплоемкости C вместо значения, даваемого теорией Эйнштейна, воспользоваться значением, даваемым законом Дюлонга и Пти.
3. Определить энергию U и теплоемкость C системы, состоящей из $N=10^{25}$ классических трехмерных независимых гармонических осцилляторов. Температура $T=300$ К.
4. Определить максимальную частоту собственных колебаний в кристалле золота по теории Дебая. Характеристическая температура равна 180 К.
5. Определить угол ϕ между орбитальными моментами импульсов двух электронов, один из которых находится в d-состоянии, другой — в f-состоянии, при следующих условиях: 1) полное орбитальное квантовое число $L=3$; 2) искомый угол — максимальный; 3) искомый угол — минимальный.

Примеры вопросов к контрольной работе № 10 (4 семестр). Контрольная работа содержит 1 задачу- 30 баллов.

1. Найти плотность кристалла неона (при 20 К), если известно, что решетка гранецентрированная кубической сингонии. Постоянная решетки при той же температуре равна 0,452 нм.
2. Вычислить удельные теплоемкости с кристаллов алюминия и меди по классической теории теплоемкости.
3. Определить относительную атомную массу кристалла, если известно, что расстояние между ближайшими соседними атомами равно 0,304 нм. Решетка объемно-центрированная кубической сингонии. Плотность кристалла равна 534 кг/м³.
4. Вычислить постоянную решетки кристалла бериллия, который представляет собой гексагональную структуру с плотной упаковкой. Параметр решетки равен 0,359 нм. Плотность кристалла бериллия равна 1,82*10³ кг/м³.
5. Система плоскостей в примитивной кубической решетке задана индексами Миллера (221). Найти наименьшие отрезки, отсекаемые плоскостью на осях координат, и изобразить эту плоскость графически.
6. Вычислить угол ϕ между нормальными к плоскостям (в кубической решетке), заданных индексами Миллера (111) и (111).
7. Электрон движется со скоростью $v=200$ Мм/с. Определить длину волны де Бройля, учитывая изменение массы электрона в зависимости от скорости.
8. Какую ускоряющую разность потенциалов U должен пройти электрон, чтобы длина волны де Бройля λ была равна 0,1 нм?
9. Определить длину волны де Бройля λ электрона, если его кинетическая энергия $T=1$ кэВ.
10. Определить длину волны де Бройля λ электронов, бомбардирующих антикатод рентгеновской трубки, если граница сплошного рентгеновского спектра приходится на длину волны $\lambda=3$ нм.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – зачёт с оценкой, 2 семестр-зачёт с оценкой, 3 семестр- зачёт с оценкой, 4 семестр-экзамен). Максимальное количество баллов за экзамен – 40 баллов. Экзаменационный билет содержит 2 вопроса и 2 задачи.

Каждый вопрос и задача оцениваются по 10 баллов.

8.3.1 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (1 семестр – зачёт с оценкой).

Билет для зачёта с оценкой включает контрольные вопросы по разделам 1 и 2 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Основы механики. Классическая механика Ньютона и граница её применимости.
2. Кинематика. Механическое движение. Система отсчёта. Материальная точка. Траектория. Перемещение и путь. Скорость и ускорение.
3. Равномерное и равнопеременное прямолинейное движение. Относительность движения. Сложение скоростей. Графики зависимости кинематических характеристик от времени при равномерном и равнопеременном движении.
4. Свободное падение тел. Ускорение свободного падения.
5. Кинематика вращательного движения. Характеристики вращательного движения.
6. Первый закон Ньютона. Инерциальные системы отсчета. Принцип относительности Галилея. Сила.

7. Второй закон Ньютона. Момент силы. Условие равновесия. Центр масс системы.
8. Третий закон Ньютона. Закон Гука. Сила трения. Трение покоя. Трение скольжения. Закон всемирного тяготения.
9. Законы сохранения. Импульс материальной точки. Второй закон Ньютона в импульсной форме. Закон сохранения импульса. Работа силы, мощность.
10. Энергия. Виды механической энергии. Консервативные системы. Закон сохранения в механике. Закон сохранения полной энергии
11. Механические колебания и волны. Гармонический колебания. Амплитуда, период, частота. Пружинный маятник, математический маятник.
12. Закон сохранения энергии при колебательном движении. Волновая поверхность. Фронт волны. Поперечные и продольные волны.
13. Основы МКТ. Опытное обоснование положений МКТ. Броуновское движение. Взаимодействие молекул.
14. Число Авогадро. Идеальный газ. Основное уравнение МКТ. Средняя квадратичная скорость движения молекул. Температура. Абсолютная температура.
15. Уравнение Менделеева-Клапейрона. Универсальная газовая постоянная. Изопроцессы. Графики изопроцессов в координатах p - V , V - T , p - T . Закон Дальтона.
16. Испарение и конденсация. Насыщенные и ненасыщенные пары. Кипение жидкости. Влажность воздуха. Кристаллические и аморфные тела.
17. Основы термодинамики. Внутренняя энергия. Количество теплоты. Теплоемкость вещества. Работа в термодинамике.
18. Первый закон термодинамики. Адиабатный процесс. Необратимость процессов в природе.
19. Второй закон термодинамики. КПД тепловых двигателей. Идеальная тепловая машина.

8.3.2 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – зачёт с оценкой).

Билет для зачёта с оценкой включает контрольные вопросы по разделам 3,4 и 5 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса и 2 задачи, по 10 баллов.

1. Предмет кинематики. Кинематические характеристики поступательного движения. Перемещение, скорость, нормальное и тангенсальное ускорение.
2. Вращательное движение твердого тела и его кинематические характеристики: угловое перемещение, угловая скорость, угловое ускорение.
3. Предмет динамики. Инерциальные системы отсчета. Принцип относительности Галилея.
4. Массы и силы в механике (гравитационные, упругие, вязкие). Законы Ньютона и закон сохранения импульса.
5. Работа постоянной и переменной силы. Потенциальная и кинетическая энергия. Закон сохранения энергии в природе.
6. Момент силы и момент инерции материальной точки и твердого тела. Уравнение динамики вращательного движения твердого тела относительно оси.
7. Закон сохранения момента импульса. Жесткий ротатор, как модель двухатомной молекулы. Приведенная масса и ее роль.
8. Кинематика гармонических колебаний. Амплитуда, частота и фаза гармонических колебаний. Векторная диаграмма. Сложение колебаний одного направления и одинаковой частоты.
9. Динамика гармонических колебаний. Дифференциальные уравнения гармонических колебаний. Математический, пружинный и физический маятник. Двухатомная молекула, как линейный гармонический осциллятор.

10. Дифференциальные уравнения затухающих и вынужденных колебаний. Логарифмический декремент затухания. Зависимость амплитуды вынужденных колебаний от частоты вынуждающей силы. Понятие о резонансе.
12. Волновые движения. Волны продольные и поперечные. Длина волны, волновое число. Дифференциальное волновое уравнение. Энергия переносимая волной. Поток энергии и плотности потока энергии. Волнового движения.
13. Молекулярно-кинетический метод изучения системы многих частиц (атомов и молекул). Размеры, сечения столкновения и средняя длина свободного пробега молекул. Число Ван-дер-Ваальса.
14. Идеальный газ. Основное уравнение Молекулярно-кинетической теории идеального газа. Функция распределения молекул по абсолютным значениям скорости (распределение Максвелла). Вероятнейшая, средняя арифметическая и средняя квадратичная скорость молекул.
15. Термодинамический метод в физике. Основные понятия и параметры характеризующие состояние системы (объем, давление, температура). Внутренняя энергия. Первое начало термодинамики и его применение к изопроцессам (изотерам, изохора, изобара, адиабата). Теплоемкость идеального газа при постоянном давлении и постоянном объеме.
16. Обратимые и необратимые процессы. Цикл Карно. Второе начало термодинамики. Понятие об энтропии.
17. Элементы физической кинетики. Перенос энергии, импульса и массы на молекулярном уровне. Диффузия, закон Фика. Теплопроводность, закон Фурье. Внутреннее трение (вязкость). Закон Ньютона.
18. Коэффициенты переноса и их зависимости от давления, температуры и размеров молекул. Особенности явлений переноса в ультраразряженных газах.
19. Реальный газ. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Физический смысл входящих в него поправок, отличающий реальный газ от идеального. Изотермы реальных газов. Фазовые переходы. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса.

8.3.3 Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – зачет с оценкой).

Билет для зачёта включает контрольные вопросы по разделам 6 и 7 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса и 2 задачи, по 10 баллов.

1. Электромагнетизм. Магнитное взаимодействие постоянных токов. Вектор магнитной индукции. Закон Ампера. Закон Био-Савара-Лапласа.
2. Магнитная индукция прямого и кругового тока. Магнитный дипольный момент кругового тока. Теорема о циркуляции. Сила Лоренца. Движение заряженных частиц в однородном магнитном поле.
3. Магнитные свойства вещества. Гипотеза Ампера. Напряженность магнитного поля. Намагниченность. Магнитная проницаемость и магнитная восприимчивость. Классификация магнетиков (диамагнетики, парамагнетики, ферромагнетики, антиферромагнетики, ферримагнетики).
4. Электромагнитная индукция. Магнитный поток. Работа сил магнитного поля. Уравнение электромагнитной индукции (закон Фарадея-Максвелла). Правило Ленца. Вихревое электрическое поле.
5. Самоиндукция. Индуктивность соленоида. Экстратоки замыкания и размыкания. Энергия магнитного поля. Объемная плотность энергии магнитного поля.
6. Уравнения Максвелла. Ток смещения. Вектор электрического смещения. Уравнение непрерывности для плотности тока. Закон полного тока. Система уравнений Максвелла в интегральной форме и физический смысл входящих в неё уравнений.
7. Возникновение электромагнитной волны. Плоская электромагнитная волна. Скорость

распространения электромагнитной волны. Энергия, переносимая электромагнитной волной. Вектор Пойнтинга. Принцип относительности в электродинамике.

8. Электромагнитная природа света. Поперечность электромагнитных волн. Монохроматические волны. Когерентность. Методы получения когерентных источников. Условия усиления и ослабления света при интерференции.

9. Оптическая длина пути и оптическая разность хода лучей. Интерференция волн от двух когерентных точечных источников. Ширина интерференционной полосы. Интерферометр Майкельсона. Интерференция света в тонких пленках.

10. Дифракция волн. Принцип Гюйгенса. Отражение и преломление света на границе раздела двух диэлектриков. Полное отражение и его применение в технике.

11. Волноводы и световоды. Принцип Гюйгенса-Френеля. Метод зон Френеля. Дифракция Френеля на простейших преградах. Дифракция Фраунгофера на щели. Дифракционная решетка как спектральный прибор.

12. Поляризация волн. Естественный и поляризованный свет. Форма и степень поляризации монохроматических волн. Получение и анализ линейно-поляризованного света. Закон Брюстера. Закон Малюса.

13. Двойное лучепреломление. Искусственная оптическая анизотропия. Электрооптические и магнитооптические эффекты. Рассеяние света. Закон Релея. Поглощение света. Закон Ламберта-Бугера-Бэра. Дисперсия света. Нормальная и аномальная дисперсия.

14. Тепловое излучение. Спектральные характеристики теплового излучения. Закон Кирхгофа. Абсолютно черное тело. Законы Стефана-Больцмана и Вина. Формула Рэлея-Джинса и «ультрафиолетовая катастрофа». Гипотеза Планка.

15. Квантовое объяснение законов теплового излучения. Корпускулярно-волновой дуализм света. Внешний фотоэффект. Законы фотоэффекта. Уравнение Эйнштейна для фотоэффекта и объяснения законов фотоэффекта. Определение постоянной Планка.

16. Элементы специальной теории относительности. Эффект Комптона. Коротковолновая граница рентгеновского излучения. Фотон – элементарная частица. Энергия, масса и импульс фотона.

17. Модель атома Томсона. Опыты Резерфорда по рассеянию альфа-частиц. Ядерная модель атома. Эмпирические закономерности в атомных спектрах излучения атома водорода.

18. Постулаты Бора. Атом водорода по Бору. Сериальная формула.

19. Волновые свойства микрочастиц. Гипотеза де Бройля. Опыты Дэвиссона и Джермера. Дифракция электронов.

20. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Оценка с помощью соотношения неопределенностей энергии основного состояния связанной частицы, и естественной ширины спектральной линии.

21. Волновая функция и её статистический смысл. Нормировка волновой функции. Волновое уравнение Шредингера для стационарных состояний. Стандартные условия, налагаемые на волновую функцию.

22. Квантовая частица в одномерной, бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной яме. Собственные значения энергии частицы и собственные нормированные волновые функции, описывающие её состояние.

23. Одномерная потенциальная ступень (порог). Коэффициент отражения и прохождения. Одномерный потенциальный барьер. Коэффициент прохождения (прозрачности).

24. Стационарное уравнение Шредингера для атома водорода (в сферических координатах). Собственные волновые функции и квантовые числа, характеризующие состояние электрона в атоме.

25. Собственная волновая функция, описывающая основное состояние атома водорода. Радиальное распределение плотности вероятности обнаружения электрона. Квантовый гармонический и ангармонический осцилляторы. Молекулярные спектры.

26. Орбитальное гироманнитное отношение. Опыты Штерна-Герлаха. Спин электрона. Спиновое гироманнитное отношение. Спин-орбитальное взаимодействие.
27. Многоэлектронный атом. Атомный терм. Мультиплетность. Магнитный момент атома. Фактор Ланде. Эффект Зеемана.
28. Элементы квантовой статистики. Квантовая система из одинаковых частиц. Принцип тождественности одинаковых частиц.
29. Симметричные и антисимметричные волновые функции, описывающие состояния тождественных микрочастиц. Бозоны и фермионы. Принцип Паули. Квантовые статистические распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака. Энергия Ферми. Вырожденный электронный газ.
30. Понятия о квантовых теориях теплоемкостей по Эйнштейну и Дебаю. Характеристические температуры. Фононы. Предельный закон Дебая.
31. Состав атомного ядра. Характеристики ядра: заряд, масса, энергия связи нуклонов. Ядерные реакции. Деление ядер. Синтез ядер. Понятие о дозиметрии и защите.
32. Фундаментальные взаимодействия и основные классы элементарных частиц. Современная физическая картина мира: иерархия структур материи, эволюция Вселенной, физическая картина мира как философская категория.

8.3.3. Примеры контрольных вопросов для итогового контроля освоения дисциплины (4 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 8-11 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса и 2 задачи, по 10 баллов

1. Элементы квантовой статистики. Квантовая система из одинаковых частиц. Принцип тождественности одинаковых частиц.
2. Симметричные и несимметричные волновые функции, описывающие состояния тождественных микрочастиц. Бозоны и фермионы.
3. Принцип Паули. Квантовые статистические распределения Бозе-Эйнштейна и Ферми-Дирака. Вырожденный электронный газ в кристаллах (металлы).
4. Металлы, диэлектрики и полупроводники с точки зрения зонной теории. Энергетические зоны: статистика Ферми-Дирака, энергия Ферми. Электрон в периодическом поле кристалла: эффективная масса электрона.
5. Элементы физики твёрдого тела. Физика твёрдого тела (ФТТ): определение, связь с другими дисциплинами, объекты изучения, круг решаемых задач. Связь с кристаллографией, кристаллофизикой и кристаллохимией.
6. Конденсированное состояние. Подход к описанию твёрдых тел. Структура кристаллов. Симметрия и физические свойства кристаллов.
7. Типы кристаллических структур (общая характеристика). Плотные упаковки: кубическая и гексагональная (на качественном уровне).
8. Понятие о сверхпроводимости (квантовые представления на качественном уровне).

8.4 Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (1, 2 и 3 семестр) и экзамена (4 семестр)

Зачёт с оценкой по дисциплине «Физика» проводится в 1,2 и 3 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-7 рабочей программы дисциплины. Билет для **зачёта с оценкой** состоит из 2 вопросов и 2 задач, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для зачёта с оценкой:

«Утверждаю» зав.каф. Сколтеха (Должность, наименование кафедры) В.Ф.Травень (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 2023г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль - «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Физика	
Билет № 1	
1. Работа постоянной и переменной силы. Потенциальная и кинетическая энергия. Закон сохранения энергии в природе. 2. Обратимые и необратимые процессы. Цикл Карно. Второе начало термодинамики. Понятие об энтропии. 3. Водород массой 4 г был нагрет на 10 К при постоянном давлении. Определить работу А расширения газа. 4. Тело брошено под некоторым углом к горизонту. Найти этот угол, если горизонтальная дальность полета в 4 раза больше максимальной высоты траектории.	

Экзамен по дисциплине «Физика» проводится в 4 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 8-11 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 2 вопросов и 2 задач, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для экзамена:

«Утверждаю» зав.каф. Сколтеха (Должность, наименование кафедры) В.Ф.Травень (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 2023г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль - «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Физика	
Билет № 1	
1. Симметричные и несимметричные волновые функции, описывающие состояния тождественных микрочастиц. 2. Металлы, диэлектрики и полупроводники с точки зрения зонной теории 3. Определить энергию U и теплоемкость C системы, состоящей из $N=10^{25}$ классических трехмерных независимых гармонических осцилляторов. Температура $T=300$ К.. 4. Вычислить постоянную решетки кристалла бериллия, который представляет собой гексагональную структуру с плотной упаковкой. Параметр решетки равен 0,359 нм. Плотность кристалла бериллия равна $1,82 \cdot 10^3$ кг/м³.	

9 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1 Рекомендуемая литература

А. Основная литература:

1. Курс общей физики: в 4 т. - Т. 1. Механика. Молекулярная физика и термодинамика: учебное пособие / И.В. Савельев; под общ. ред. В.И. Савельева. - 2-е изд., стер. — М.: КНОРУС, 2012. - 528 с
2. Курс общей физики: в 4 т. - Т. 2. Электричество: учебное пособие / И.В. Савельев; под общ. ред. В.И. Савельева. - 2-е изд., стер. - М.: КНОРУС, 2012. - 442 с
3. Курс общей физики: в 4 т. - Т. 3. Оптика, атомная физика, физика атомного ядра и элементарных частиц: учебное пособие / И.В. Савельев; под общ. ред. В.И. Савельева. - 2-е изд., стер. - М.: КНОРУС, 2012. - 537 с
4. Чертов А.Г., Воробьев А.А. Задачник по физике. - М.: Высш. шк. - 1988. - 527 с
5. Трофимова Т.И. Курс физики: учеб. пособие для вузов. - Изд. 17-е, стер, - М.: Издательский центр «Академия», 2008. - 560 с.

Б. Дополнительная литература:

1. Общий курс физики: Учебное пособие для вузов: В 5 томах Том 1: Механика /Сивухин Д.В., - 6-е изд., стер. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2014. - 560 с.
2. Общий курс физики: Учебное пособие для вузов: В 5 томах Том 2: Термодинамика и молекулярная физика /Сивухин Д.В., - 6-е изд., стер. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2014. - 544 с.
3. Общий курс физики: Учебное пособие для вузов: В 5 томах Том 3: Электричество /Сивухин Д.В., - 6-е изд., стер. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2015. - 656 с.
4. Иродов И. Е. Механика. Основные законы [Электронный ресурс] - 13-е изд. (эл.). - М.: Лаборатория знаний, 2017. – 312 с.
5. Иродов И. Е. Электромагнетизм. Основные законы [Электронный ресурс] – 10-е изд. (эл.). – М.: Лаборатория знаний, 2017 – 322 с.
6. Иродов И. Е. Волновые процессы. Основные законы [Электронный ресурс] - 7-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. – 265 с.
7. Иродов И. Е. Квантовая физика. Основные законы [Электронный ресурс]: учебное пособие - 7-е изд. (эл.). – М.: Лаборатория знаний, 2017 – 261 с.

9.2 Рекомендуемые источники научно-технической информации

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://www.rsl.ru> - Российская Государственная Библиотека
- <http://www.gpntb.ru> - Государственная публичная научно-техническая библиотека России
- <http://lib.msu.ru> - Научная библиотека Московского государственного университета
- <http://window.edu.ru> - Полнотекстовая библиотека учебных и учебно-методических материалов
- <http://abc-chemistry.org/ru/> - ABC-Chemistry : Бесплатная научная химическая информация
- <http://www.fips.ru/cdfi/fips2009.dll> - Сайт ФИПС. Информация о патентах
- <http://findebookee.com/> - поисковая система по книгам
- <http://elibrary.ru> - Научная электронная библиотека
- <http://lcweb.loc.gov> - Библиотека Конгресса США

9.3 Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:
сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Физика» проводятся в форме лекций, семинаров и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Аудитория с доской, компьютером, проектором и экраном.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Введение в механику.	<i>Знает:</i> - физические основы механики; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> - применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; - проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом	Оценка за контрольную работу №1 (1 семестр) Оценка за зачёт (1 семестр)

	физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	
Раздел 2. Введение в молекулярно-кинетическую теорию и термодинамику.	<i>Знает:</i> - физические основы молекулярно-кинетической теории и термодинамики; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> - применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; - проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	Оценка за контрольную работу №2 (1 семестр) Оценка за зачет (1 семестр)
Раздел 3. Физические основы механики	<i>Знает:</i> - физические основы механики; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического	Оценка за контрольную работу №3 (2 семестр) Оценка за зачёт (2 семестр)

	эксперимента. <i>Умеет:</i> -применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; -проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	
Раздел 4. Основы молекулярной физики	<i>Знает:</i> - физические основы молекулярной физики; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> -применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; -проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую	Оценка за контрольную работу №4 (2 семестр) Оценка за зачёт (2 семестр)

	информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	
Раздел 5. Электростатика и постоянный электрический ток	<i>Знает:</i> - физические основы электростатики и электродинамики; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> - применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; - проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	Оценка за контрольную работу №5 (3 семестр) Оценка за зачёт (1 семестр)

Раздел 6. Электромагнетизм	<i>Знает:</i> -физические основы электромагнетизма; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> -применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; -проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	Оценка за контрольную работу №6 (3 семестр) Оценка за зачёт (3 семестр)
Раздел 7. Оптика	<i>Знает:</i> -физические основы геометрической и волновой оптики; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> -применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при	Оценка за контрольную работу № 7 (3 семестр) Оценка за зачёт (3 семестр)

	решении профессиональных задач; -проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	
Раздел 8. Элементы квантовой физики	<i>Знает:</i> - физические основы квантовой физики; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> -применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; -проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i>	Оценка за контрольную работу №8 (3 семестр) Оценка за зачёт (3 семестр)

	- навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	
Раздел 9. Элементы квантовой статистики	<i>Знает:</i> - физические основы квантовой статистики; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> - применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; - проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	Оценка за контрольную работу №9 (4 семестр) Оценка за экзамен (4 семестр)

Раздел 10. Металлы, диэлектрики и полупроводники с точки зрения зонной теории	<i>Знает:</i> -физические основы зонной теории; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> -применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач; -проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	Оценка за контрольную работу №9 (4 семестр) Оценка за экзамен (4 семестр)
Раздел 11. Элементы физики твёрдого тела	<i>Знает:</i> -физические основы физики твёрдого тела; - смысл фундаментальных физических законов, принципов и постулатов; их формулировки и границы применимости; - связь широкого круга физических явлений с фундаментальными принципами и законами физики; - основные методы решения задач по описанию физических явлений; - методы обработки результатов физического эксперимента. <i>Умеет:</i> -применять теоретические знания и экспериментальные методы исследования при решении профессиональных задач;	Оценка за контрольную работу № 10 (4 семестр) Оценка за экзамен (4 семестр)

	-проводить расчёты, осуществлять анализ и на основе этого делать обоснованные выводы; - анализировать результаты наблюдений и экспериментов с применением основных законов и принципов физики; - определять характер физических процессов по комплексу экспериментальной информации при помощи графиков, таблиц и уравнений; - представлять обработанную экспериментальную и теоретическую информацию в устной и письменной форме, в том числе с использованием современных компьютерных технологий. <i>Владеет:</i> - навыками работы с широким кругом физических приборов и оборудования; - навыками обоснования своих суждений и выбора метода исследования.	

15 ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);
- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программ бакалавриата, программ специалитета, программ магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;
- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащённости образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Физическая химия»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом МГУ к.х.н. Константиновой Н.М.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Физическая химия»** относится к Обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области общей физики.

Цель дисциплины – показать роль физической химии как теоретического фундамента современной химии, научить основам химической термодинамики, теории растворов и фазовых и химических равновесий, основам химической кинетики и катализа, электрохимии, дать представления о механизмах химических реакций.

Задачи дисциплины – привить учащимся навыки систематического подхода к решению химических задач фундаментального и прикладного характера, познакомить с современными подходами и методами изучения физико-химических свойств веществ и многокомпонентных систем.

Дисциплина **«Физическая химия»** преподается в 5 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;
Безопасность жизнедеятельности	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций помощь, описывает способы участия в восстановительных мероприятиях

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

знать:

- основные законы и закономерности, определяющие направление и результат протекания процессов в гомогенных и гетерогенных системах;
- способы аналитического описания свойств физико-химических систем;

уметь:

- формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе физической химии;
- получать физико-химические данные,
- проводить их математическую обработку,
- обобщать полученные результаты,

владеть:

- простейшими расчетными методами решения физико-химических задач;
- навыками поиска физико-химических данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применением их при решении практических химических задач.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3,6	128	97,2
Лекции	1,8	64	48,6
Практические занятия (ПЗ)	1,8	64	48,6
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,4	52	37,8
Контактная самостоятельная работа	1,4		-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		52	37,8
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак зан.	Сам. работа
	Раздел 1. Введение в физическую химию. Основные законы и постулаты физической химии. Математический аппарат.	56	20	20	16
1.1	Физическая химия, ее место среди других разделов химии, основные понятия.	5,6	2	2	1,6
1.2	Уравнения состояния газовой и конденсированной фазы.	5,6	2	2	1,6
1.3	Первый закон термодинамики.	11,2	4	4	3,2
1.4	Термохимия. Теплосодержание	11,2	4	4	3,2
1.5	Второй закон термодинамики.	11,2	4	4	3,2
1.6	Термодинамические потенциалы.	11,2	4	4	3,2
	Раздел 2. Приложения химической термодинамики. Растворы. Фазовые и химические равновесия.	79	28	28	23
2.1	Растворы, законы в газовых и конденсированных системах.	5,7	2	2	1,7
2.2	Идеальные и реальные растворы. Модели растворов неэлектролитов.	11,3	4	4	3,3
2.3	Растворы электролитов.	11,3	4	4	3,3
2.4	Фазовые равновесия однокомпонентных систем.	5,7	2	2	1,7
2.5	Фазовые равновесия двухкомпонентных систем.	22,4	8	8	6,4
2.6	Химическое равновесие. Факторы, влияющие на выход реакции (процесса).	11,3	4	4	3,3
2.7	Дополнительные виды работ (адсорбционные и электрохимические равновесия).	11,3	4	4	3,3
	Раздел 3. Формальная химическая кинетика. Катализ.	45	16	16	13
3.1	Основные понятия. Описание реакции различных порядков. Зависимость скорости реакций от температуры.	16,9	6	6	4,9
3.2	Сложные реакции. Приближенные методы химической кинетики.	16,9	6	6	4,9
3.3	Основы катализа. Гомогенный и гетерогенный виды катализа.	11,2	4	4	3,2
	ИТОГО	180	64	64	52
	Экзамен (если предусмотрен УП)	36			
	ИТОГО	216			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Введение в физическую химию. Основные законы и постулаты физической химии. Математический аппарат.

Предмет и метод термодинамики. Термодинамическая система, контрольная поверхность, среда. Термодинамические переменные и их классификации (внутренние, внешние, интенсивные, экстенсивные, обобщенные силы и обобщенные координаты и т. п.). Термодинамические процессы (обратимые, необратимые, самопроизвольные, несамопроизвольные, изотермические, изобарные, изохорные, адиабатические). Теплота и работа. Функции состояния и функционалы. Постулаты термодинамики.

Уравнения состояния идеальных и реальных газов. Уравнение Ван-дер-Ваальса и его анализ. Критическая точка и критические параметры. Вириальные уравнения состояния. Фактор сжимаемости. Принцип соответственных состояний. Уравнения состояния для жидкостей и твердых тел.

Первый закон термодинамики. Его формулировка и запись в дифференциальной и интегральной формах. Внутренняя энергия как термодинамическая функция и ее молекулярная интерпретация. Зависимость внутренней энергии от температуры и объема. Энтальпия как функция состояния. Вычисление работы для различных процессов в газах. Взаимные превращения теплоты и работы.

Теплоты различных процессов. Теплоемкости газов и кристаллических тел. Зависимость теплоемкости от давления и температуры для индивидуального вещества. Способы оценки теплоемкостей.

Термохимия. Теплоты химических реакций. Термохимические уравнения. Закон Гесса. Теплоты сгорания и энтальпии образования, энтальпии образования ионов в растворах, их использование для расчета тепловых эффектов химических реакций (в т.ч. с использованием таблиц термодинамических свойств индивидуальных веществ). Стандартное состояние и стандартные теплоты химических реакций. Зависимость тепловых эффектов реакций от температуры и давления. Уравнение Кирхгоффа в дифференциальной и интегральной формах.

Второй закон термодинамики, его различные формулировки и их взаимосвязь. Изменение энтропии при различных обратимых процессах и вычисление энтропии из опытных данных. Вычисление энтропии идеальных газов. Изменение энтропии при необратимых процессах. Неравенство Клаузиуса. Некомпенсированная теплота и «потерянная работа».

Тепловая теорема Нернста. Постулат Планка и область его применимости. Свойства тел вблизи абсолютного нуля. Абсолютные значения энтропии. Условия фазового равновесия.

Математический аппарат термодинамики. Фундаментальное уравнение Гиббса. Преобразования Лежандра. Определение функций состояния F , G , H . Соотношения Максвелла. Уравнение Гиббса-Дюгема. Определение $C_p - C_v$: в общем виде, для идеального и реальных газов. Вычисление энергии (энтальпии) как функций температуры и объема (давления).

Характеристические функции, их определение и свойства. Энергии Гельмгольца и Гиббса как характеристические функции. Условия равновесия и экстремумы характеристических функций. Уравнение Гиббса-Гельмгольца и его различные формы.

Раздел 2. Приложения химической термодинамики. Растворы. Фазовые и химические равновесия.

Классификация растворов. Способы выражения состава раствора. Смеси идеальных газов. Закон Рауля и закон Генри. Термодинамические свойства газовых смесей.

Химический потенциал компонента идеального и реального газового и конденсированного раствора. Стандартное состояние для химического потенциала. Летучесть и ее вычисление для реальных газов. Метод активностей Льюиса. Расчет коэффициентов активности из экспериментальных данных. Парциальные молярные величины, методы их определения. Обобщенное уравнение Гиббса - Дюгема.

Функции смешения. Термодинамические модели растворов. Уровни отсчета свойств растворов, избыточная энергия Гиббса раствора. Симметричная и несимметричная системы отсчета. Предельно разбавленные растворы, атермальные, регулярные, строго регулярные растворы и их свойства. Современные модели растворов неэлектролитов (общие представления). Коллигативные свойства растворов. Осмос.

Энергии кристаллической решетки и сольватации ионов. Растворы электролитов. Среднеионный коэффициент активности. Различные приближения теории Дебая-Хюккеля. Способы оценки термодинамических свойств растворов электролитов.

Правило фаз Гиббса. Определение фазы, компонента, числа степеней свободы, фазовой диаграммы. Вывод правила фаз. Формульная матрица.

Расчеты фазовых равновесий в однокомпонентной системе: а) из общего условия равновесия, б) из частного условия равновесия в дифференциальной и интегральной формах. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса и фазовые переходы первого рода. Его применение к процессам плавления, испарения и сублимации в однокомпонентных системах. Уравнение Антуана. Фазовые переходы второго рода.

Расчеты фазовых равновесий а) из общего условия равновесия, б) из частных условий равновесия в двухкомпонентных системах: 1) жидкость-газ, 2) с простой эвтектикой, 3) взаимной растворимостью компонентов в твердом и жидком состоянии. Законы Гиббса-Коновалова. Азеотропные смеси и их свойства. Вывод уравнений Шредера и Планка-ван Лаара. Коллигативные свойства растворов. Осмос.

Трехкомпонентные системы. Треугольник Гиббса, способ определения состава системы.

Химическая переменная. Общие и частные условия химического равновесия. Уравнение изотермы химической реакции. Связь между разными константами равновесия. Термодинамические расчеты выхода продуктов реакции при протекании одной и нескольких химических реакций.

Зависимость константы равновесия от температуры. Уравнение изобары Вант-Гоффа и его интегрирование. Расчеты констант химических равновесий с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование при расчетах химических равновесий. Нетермохимическое определение теплот реакций. Принцип Ле Шателье-Брауна.

Расчеты выходов продуктов реакции для неидеальных систем. Зависимость выхода от природы инертного растворителя.

Химические равновесия в гетерогенных системах с образованием и без образования твердых растворов (запись констант равновесия, примеры). Расчеты констант

химических равновесий с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Современные методы расчета составов равновесных смесей.

Адсорбент, адсорбат. Виды адсорбции. Метод «избытков Гиббса» и метод «полного содержания». Уравнения изотермы и изобары адсорбции. Изостерическая теплота адсорбции. Уравнение Ленгмюра, его термодинамический вывод и условия применимости. Уравнения Генри и Фрейндлиха. Константа адсорбционного равновесия. Полимолекулярная адсорбция, ее приближенное описание методом Брунауэра - Эммета - Теллера (БЭТ). Использование уравнения БЭТ для определения поверхности адсорбентов.

Окислительно-восстановительные реакции в гальваническом элементе. Электрохимические равновесия на границах раздела фаз и в электрохимической цепи. Понятие электродного потенциала. ЭДС. Связь ЭДС с энергией Гиббса потенциалообразующей реакции. Уравнения Нернста и Гиббса - Гельмгольца для равновесной электрохимической цепи. Потенциометрия как метод определения термодинамических свойств конденсированных фаз.

Раздел 3. Формальная химическая кинетика. Катализ.

Основные понятия и методы формальной кинетики. Экспериментальное определение скорости химической реакции в закрытой и открытой системах. Кинетические уравнения и методы их изучения. Молекулярность и порядок реакции. Методы определения порядка реакции. Реакции переменного порядка и изменение порядка в ходе реакции (на примере реакции образования HBr). Прямая и обратная задачи химической кинетики.

Постулаты формальной кинетики. Кинетический закон действующих масс, принцип независимости реакций, принцип детального равновесия. Лимитирующие стадии сложных химических реакций. Зависимость константы скорости химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса, энергия активации.

Формально-кинетические уравнения реакций n -го порядка. Дифференциальная и интегральная формы кинетических уравнений. Время полупревращения, среднее время жизни.

Сложные реакции. Обратимые реакции первого порядка. Связь констант скоростей прямой и обратной реакции с константой равновесия и термодинамическими потенциалами. Параллельные реакции. Энергия активации сложных реакций. Последовательные реакции. Вывод кинетического уравнения и его анализ для необратимой реакции: $\text{A} \rightarrow \text{B} \rightarrow \text{C}$. Кинетические кривые и экспериментальное определение констант скоростей.

Метод квазистационарности Боденштейна и область его применимости. Теорема Тихонова, анализ точного и приближенного решения кинетического уравнения для реакции $\text{A} \rightarrow \text{B} \rightarrow \text{C}$. Метод квазиравновесных концентраций.

Основные понятия и применения катализа, определения и классификации. Основные механизмы каталитических реакций: переносный, активационный, координационный. Вакер-процесс; механизм Косси для реакции Циглера-Натта. Каталитические реакции основных процессов химической технологии.

Кисотно-основной катализ. Классификация реакций кислотно-основного катализа. Твердые кислоты как катализаторы. Свойства цеолитов как кислотно-основных катализаторов. Кинетика реакций общего кислотного и общего основного катализа. Механизмы реакций и лимитирующие стадии. Кинетические уравнения и определение элементарных констант из опытных данных. Уравнение Бренстеда и его следствия.

Кинетика реакций специфического кислотного катализа. Механизмы реакций и лимитирующие стадии процесса. Функция кислотности Гаммета и ее применение в кинетике. Кинетические уравнения для реакций кислотного катализа. Сверхкислоты, супероснования и их свойства.

Гетерогенный катализ. Кинетический закон действующих масс для гетерогенных процессов и особенности записи константы равновесия для реакции на поверхности раздела фаз. Кинетика Лэнгмюра–Хиншельвуда для реакции на однородной поверхности катализатора. Эффективные энергии активации гетерогенных процессов.

Принципы геометрического и энергетического соответствия. Современные представления о механизмах гетерогенных реакций.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	– основные законы и закономерности, определяющие направление и результат протекания процессов в гомогенных и гетерогенных системах;	+	+	+
2	– способы аналитического представления этих закономерностей	+	+	+
	Уметь:			
3	– формулировать конкретные химические задачи на основе законов и закономерностей;	+	+	+
4	– получать физико-химические данные;	+	+	+
	– проводить их математическую обработку;	+	+	+
	– обобщать полученные результаты	+	+	+
	Владеть:			
5	– простейшими расчетными методами решения физико-химических задач;	+	+	+
6	– навыками поиска физико-химических данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических химических задач	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Универсальные и Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>				
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК		
7	УК-6. Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни	УК-6.1. Использует инструменты и методы управления временем при выполнении конкретных задач, проектов, при достижении поставленных целей;	+	+

8	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций помощь, описывает способы участия в восстановительных мероприятиях	+	+	+
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК			
9	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	+	+	+
10	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе ОПК-2.4. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Уравнения состояния. Газовая и конденсированная фазы.	4
2	1	Первый закон термодинамики. Расчет работ в различных процессах.	4
3	1	Термохимия. Применение закона Гесса.	4
4	1	Второй закон термодинамики. Расчет энтропии в различных процессах.	4
5	1	Термодинамические потенциалы.	4
6	2	Расчет парциальных свойств. Растворы идеальные и предельно разбавленные.	2
7	2	Растворы реальные. Модели растворов.	4
8	2	Растворы электролитов.	2
9	2	Коллигативные свойства растворов неэлектролитов и электролитов.	2
10	2	Расчет фазовых диаграмм однокомпонентных систем.	2
11	2	Расчет фазовых диаграмм двухкомпонентных систем.	4
12	2	Применение современных программных комплексов для расчетов фазовых диаграмм	4
13	2	Химическое равновесие	4
14	2	Равновесие при наличии других видов работ (адсорбционные и электрохимические равновесия)	4
15	3	Решение прямой кинетической задачи для реакций различных порядков.	2
16	3	Способы определения порядков реакций.	2
17	3	Температурная зависимость константы скорости реакции от температуры.	2
18	3	Сложные реакции.	4
19	3	Квазистационарное и квазиравновесное приближения при решении кинетических уравнений.	2
20	3	Гетерогенный и гомогенный катализ	4

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине «*Физическая химия*» не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;

– подготовку к сдаче **экзамена** (5 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов), и итогового контроля в форме **экзамена** (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы (по одной контрольной работе по каждому разделу). Максимальная оценка за контрольные работы составляет 20 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 4 балла за вопрос.

Задача 1.1.

Для решетчатого газа известно уравнение состояния: $p(V, T) = -\frac{RT}{a} \ln \left(1 - \frac{a}{V} \right)$, где a – постоянная. Найдите зависимость внутренней энергии от объема и энтальпии от давления для такого газа.

Задача 1.2.

Найдите стандартную энтальпию реакции $\text{H}_{2(\text{г})} + \text{Cl}_{2(\text{г})} = 2\text{H}_{(\text{г})} + 2\text{Cl}_{(\text{г})}$ при $T = 2000\text{K}$, если известны стандартные энтальпии образования атомарных водорода и хлора: $\Delta_f H_0^\circ(\text{H}_{(\text{г})}) = 216 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$, $\Delta_f H_0^\circ(\text{Cl}_{(\text{г})}) = 119.6 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$. Изменение энтальпии газов, находящихся в стандартном состоянии от 0 до 2000K ($H_{2000}^\circ - H_0^\circ$) равно 61.4 кДж·моль⁻¹ для $\text{H}_{2(\text{г})}$, 72.4 кДж·моль⁻¹ для $\text{Cl}_{2(\text{г})}$, 41.57 кДж·моль⁻¹ для $\text{H}_{(\text{г})}$ и 43.78 кДж·моль⁻¹ для $\text{Cl}_{(\text{г})}$. Определите также тепловой эффект реакции при постоянном объеме и температуре 298K.

Задача 1.3.

Когда оценивают шансы на успех при синтезе нового химического соединения, часто используют величины энергий кристаллических решеток. Эти энергии можно рассчитать теоретически.

Можно ли синтезировать MnF_4 по реакции:



если энергии кристаллических решеток MnF_4 и MnF_3 равны, соответственно, -906 и - 690 кДж·моль⁻¹. Энтальпия образования атома фтора: 73.9 кДж · моль⁻¹, сродство к электрону атома фтора: - 334 кДж·моль⁻¹, четвертый потенциал ионизации марганца: 450 кДж·моль⁻¹. Все величины относятся к 0К. Дайте заключение о возможности синтеза. Какие допущения сделаны? Оцените давление фтора в системе, при котором синтез MnF_4 может быть осуществлен при 298К. Эта оценка снизу или сверху?

Задача 1.4

Рассчитайте энтропию 2 моль паров SO_2Cl_2 при температуре 100°C и давлении 0.2 атм, если известно следующее: $T_{исп} (SO_2Cl_2) = 69^\circ C$, стандартная энтальпия испарения при этой температуре $\Delta H^\circ_{исп} = 30.4$ кДж·моль⁻¹, $S^\circ_{298} = 217.2$ Дж·моль⁻¹·К⁻¹, теплоемкость можно считать не зависящими от температуры, значения $C_{p,ж} (SO_2Cl_2) = 131.8$ Дж·моль⁻¹·К⁻¹ и $C_{p,г} (SO_2Cl_2) = 77.4$ Дж·моль⁻¹·К⁻¹.

Задача 1.5.

Экспериментальная зависимость стандартной энергии Гиббса реакции $\frac{1}{2} H_2 + \frac{1}{2} Cl_2 = HCl$ дается уравнением $\Delta_r G^\circ = -22010 + 0.44 \cdot T \ln T - 4.95 \cdot T$ (кал). Найдите значение стандартной энтальпии образования и абсолютной энтропии HCl при 298 К.

Вещество	S°_{298} , кал · моль ⁻¹ ·К ⁻¹	$C_{p,298}$, кал · моль ⁻¹ ·К ⁻¹
H ₂	31.22	2.11
Cl ₂	53.34	8.12

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 4 балла за вопрос.

Задача 2.1.

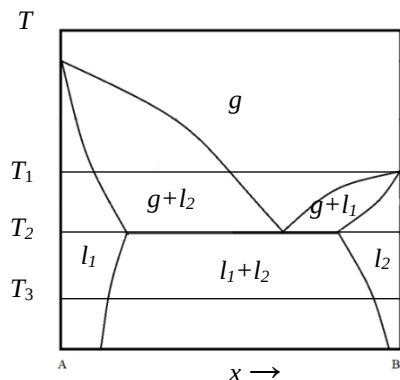
Выведите выражение для химического потенциала и коэффициента активности первого компонента атермального раствора.

Задача 2.2.

Газовая смесь, содержащая 97 мольных % H_2O и 3 мольных % H_2 , нагрета до 1000 К. Будет ли эта смесь реагировать с Ni, образуя NiO, если для реакции $Ni (тв) + 0.5O_2 = NiO (тв)$ $\Delta_r G^\circ(1000 K) = -35400$ кал/моль, а степень диссоциации водяного пара по уравнению $H_2O = H_2 + 0.5O_2$ при 1000 К и давлении 1 атм равна $2.467 \cdot 10^{-7}$?

Задача 2.3.

На диаграмме Розембома изобразите вид возможных концентрационных зависимостей энергий Гиббса фаз при заданных значениях температуры.



Задача 2.4.

Стандартная температура кипения пропана 231 К и *n*-бутана 273 К. Используя параметры уравнения Антуана для пропана и *n*-бутана,

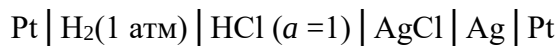
$$\lg p(\text{бар}) = A - B/(T(\text{К}) + C)$$

	C ₃ H ₈	<i>n</i> -C ₄ H ₁₀
A	3.98292	3.85002
B	819.296	909.65
C	-24.417	-36.146

- 1) Определите состав (мольные доли) жидкой и газовой фазы при 265 К, 250 К и 235 К и общем давлении $p = 1$ бар. Примите, что жидкая фаза подчиняется закону Рауля.
- 2) На основании рассчитанных данных изобразите сечение T - x фазовой диаграммы при $p = 1$ бар
- 3) Используя полученную фазовую диаграмму, оцените отношение количества каждой фазы для системы, содержащей 5 моль пропана и 5 моль *n*-бутана при температуре 245К и давлении 1 бар.

Задача 2.5.

Температурная зависимость стандартной ЭДС гальванического элемента



выражается уравнением $E^0(T, \text{К}) = 0.2366 - 4.856 \cdot 10^{-4}(T - 273) - 3.421 \cdot 10^{-6}(T - 273)^2$, В. Вычислите значения термодинамических величин $\Delta_r G^0$, $\Delta_r S^0$ и $\Delta_r H^0$, характеризующих протекающую в нём при 25°C реакцию.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 5 вопросов, по 4 балла за вопрос.

Задача 3.1.

Скорость окисления бутанола-1 хлорноватистой кислотой не зависит от концентрации спирта и пропорциональна $[\text{HClO}]^2$. За какое время реакция окисления при 298 К пройдет на 90%, если исходный раствор содержал $0.1 \text{ моль} \cdot \text{л}^{-1}$ HClO и $1 \text{ моль} \cdot \text{л}^{-1}$ спирта? Константа скорости реакции равна $k = 24 \text{ л} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{мин}^{-1}$.

Задача 3.2.

Для реакции димеризации бутадиена при нормальном давлении получена следующая зависимость константы скорости от температуры:

$$\lg k = 3.362 + 0.0215T - 5070/T \text{ (м}^3 \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}\text{)}.$$

Определите энергию активации и предэкспоненциальный множитель при температуре 400К.

Задача 3.3.

Константа скорости прямой реакции *цис-транс*-изомеризации бутена-2 при 417°C равна $8.52 \cdot 10^{-7} \text{ с}^{-1}$. Константа равновесия при этой температуре равна 1.14. В начальный момент времени присутствует только *цис*-изомер. Определите время, за которое прореагирует 30 % бутена-2.

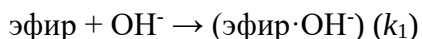
Задача 3.4.

Скорость автокаталитической реакции $A \rightarrow P$ описывается кинетическим уравнением $r = k[A][P]$. Решите это кинетическое уравнение и найдите зависимость степени превращения от времени. Начальные концентрации: $[A]_0 = a$, $[P]_0 = p$.

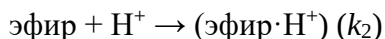
Задача 3.5.

Установлено, что гидролиз очень разбавленного раствора эфира при 25°C протекает по кислотно-основному катализу, при этом обратная реакция (этерификации) практически не происходит, эфир растворим в воде и в отсутствии катализатора константа скорости реакции практически равна нулю. Процесс протекает по следующей схеме:

Специфический основной катализ:



Специфический кислотный катализ:



Экспериментально показано, что скорость гидролиза эфира практически одинакова для значений $\text{pH} = 1$ и $\text{pH} = 9$. Получите выражение для кажущейся константы скорости реакции. Зависит ли эта константа от pH раствора? Определите, чему равно значение pH при минимальном значении кажущейся константы скорости реакции. Какой катализ (специфический кислотный или основной) более эффективен в этом случае?

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (5 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1-3 рабочей программы дисциплины и содержит 4 вопроса. по 10 баллов за вопрос.

1. Основные понятия химической термодинамики: система, фаза, компонент, составляющее системы. Классификация термодинамических свойств. Типы процессов. Постулаты и законы термодинамики. Температура.
2. Термические уравнения состояния. Уравнение состояния идеального газа. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Критическая изотерма. Критическая точка. Бинодаль и спинодаль. Термодинамические условия устойчивости.
3. Теорема о соответственных состояниях и ее трактовка в классической и статистической термодинамике. Вириальные уравнения. Уравнения состояния конденсированных фаз. Термические коэффициенты.
4. Первый закон термодинамики. Функции состояния и функции перехода. Теплота, работа и изменение внутренней энергии для различных процессов с идеальным газом. Энтальпия. Вычисление изменений внутренней энергии и энтальпии из опытных данных.
5. Закон Гесса, тепловые эффекты химических реакций. Выбор стандартного состояния. Стандартные энтальпии химических реакций. Энтальпии образования химических соединений. Следствия из закона Гесса.
6. Теплоемкости. Их определение в классической и статистической термодинамике. Зависимость теплоемкости от температуры и давления. Использование теплоемкостей для расчетов изменения энергии, энтальпии и энтропии.
7. Зависимость энтальпий химических реакций от давления и температуры. Уравнение Кирхгофа.
8. Второй закон термодинамики. Энтропия, как функция состояния. Изменение энтропии при необратимых процессах. Неравенство Клаузиуса, производство энтропии, "потерянная работа" и "некомпенсированная теплота". Вывод частных условий равновесия гетерогенной системы.
9. Энтропия как характеристическая функция переменных (U, V, n) и критерий направленности процессов. Уравнение Гиббса-Дюгема. Соотношения Максвелла. Зависимость энтропии от термодинамических переменных. Третий закон термодинамики, различные формулировки.
10. Преобразования Лежандра. Термодинамические потенциалы. Энергия Гиббса как характеристическая функция переменных (T, p, n). Уравнение Гиббса-Гельмгольца.
11. Термодинамические потенциалы как характеристические функции и критерии самопроизвольного протекания процесса. Изменение энергии Гиббса и энергии Гельмгольца в различных процессах.

12. Основные понятия термодинамики растворов. Законы Рауля и Генри. Функции образования и функции смешения. Выбор системы отсчета свойств раствора. Расчет активности компонента в разных системах сравнения.
13. Парциальные мольные свойства, их особенности и способы определения. Уравнение Гиббса-Дюгема, особенности его интегрирования.
14. Стандартный химический потенциал компонента идеальной и реальной газовой смеси. Летучесть, способы ее определения.
15. Стандартный химический потенциал компонента идеальных и реальных конденсированных растворов. Метод активностей Льюиса. Способы определения активности и коэффициентов активности.
16. Избыточная энергия Гиббса, способы ее описания. Термодинамическая классификация растворов. Регулярные и атермальные растворы. Термодинамическая устойчивость растворов. Расслаивание.
17. Энергия Гиббса растворов электролитов. Первое и второе приближения теории Дебая-Хюккеля для расчета среднего ионного коэффициента активности.
18. Ион-дипольное взаимодействие в растворах электролитов. Энергии кристаллической решетки и сольватации ионов. Уравнения Борна и Борна - Бьеррума.
19. Вывод условия равновесия гетерогенной системы. Правило фаз Гиббса.
20. Фазовые равновесия в однокомпонентных системах. Расчет фазовой диаграммы из общего и частного условия равновесия. Уравнение Клапейрона - Клаузиуса. Уравнение Антуана. Фазовые переходы первого и второго рода.
21. Расчет фазовых равновесий в двухкомпонентной системе с простой эвтектикой из общего и частных условий равновесия. Зависимость растворимости от температуры и давления (уравнения Шредера и Ван-Лаара).
22. Обобщенное уравнение фазовых равновесий Ван-дер-Ваальса. Законы Гиббса-Коновалова. Азеотропы.
23. Осмос, вывод уравнения Вант-Гоффа. Коллигативные свойства растворов неэлектролитов, вывод из фазового равновесия бинарных систем. Коллигативные свойства в растворах электролитов.
24. Общее и частные условия химического равновесия в изолированных и закрытых системах. Химическая переменная.
25. Изотерма химической реакции. Стандартная энергия Гиббса химической реакции. Различные формы записи констант равновесия и связь между ними.
26. Зависимость констант равновесия от температуры. Изобара Вант-Гоффа и ее интегрирование. Зависимость констант равновесия от давления в газовых и конденсированных фазах.

27. Расчеты констант равновесия с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций и приведенной энергии Гиббса. Расчет равновесий в сложных и реальных системах. Влияние растворителей на выход реакции.
28. Электрохимический потенциал. Условия равновесия на границе электрода с раствором и в электрохимической цепи. Уравнение Нернста.
29. Термодинамика гальванического элемента. Уравнение Гиббса-Гельмгольца и его применение к электрохимическим системам. Потенциометрия как метод определения термодинамических свойств растворов электролитов.
30. Адсорбция и ее определения. Метод избытков Гиббса, адсорбционное уравнение Гиббса.
31. Метод полного содержания. Мономолекулярная адсорбция на однородной поверхности (изотерма Лэнгмюра). Изотерма и изостера адсорбции. Полимолекулярная адсорбция. Уравнение БЭТ и его применение для определения поверхности твердых тел.
32. Основные понятия и постулаты формальной кинетики. Прямая и обратная кинетические задачи. Параметры кинетических уравнений. Молекулярность и порядок реакции. Время полупревращения.
33. Методы определения порядка реакции. Кинетическое описание необратимых реакций нулевого, первого, второго и n -го порядков в закрытых системах. Время полупревращения и среднее время жизни исходных молекул.
34. Зависимость константы скорости химической реакции от температуры. Уравнение Аррениуса, его опытная проверка и теоретическая трактовка. Энергия активации.
35. Обратимая реакция первого порядка и определение её кинетических параметров. Связь с термодинамическими функциями.
36. Параллельные реакции, определение кинетических параметров из опытных данных. Энергия активации сложной реакции.
37. Необратимые последовательные реакции первого порядка (точное и приближенное решения кинетической задачи). Метод квазистационарных концентраций и условия его применения.
38. Методы квазистационарных и квазиравновесных концентраций в химической кинетике на примере последовательной реакции с обратимостью на первой стадии.
39. Основные понятия и классификации в катализе: гетерогенный и гомогенный катализ, активность и селективность катализаторов, число оборотов (TOF и TON). Нанокатализ.
40. Механизмы кислотно-основных каталитических реакций и их классификация. Кинетика реакций специфического кислотного(основного) и общего кислотного(основного) катализа. Лимитирующие стадии процесса. Функция кислотности Гаммета. Суперкислоты.

41. Описание кинетики реакций на гетерогенной поверхности, схемы Ленгмюра-Хиншельвуда и Ридила-Или; влияние сильной адсорбции продукта на вид кинетического уравнения.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (5 семестр).

Экзамен по дисциплине «**Физическая химия**» проводится в 5 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-3 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 3 вопросов, относящихся к указанным разделам. Вопросы 1 и 2 по 15 баллов, вопрос 3- 10 баллов.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» _____ (Должность, наименование кафедры) _____ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	Код и наименование направления подготовки Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
	Физическая химия
Билет № 1 1. Основные понятия химической термодинамики: система, фаза, компонент, составляющее системы. Классификация термодинамических свойств. 2. Обобщенное уравнение фазовых равновесий Ван-дер-Ваальса. Законы Гиббса-Коновалова. Азеотропы. 3. Энергия активации сложной реакции (параллельные и обратимые реакции).	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Еремин В.В., Каргов С.А., Успенская И.А. Основы физической химии. Теория. Т.1., М.: Бином, 2013
2. Эткинс П., де Паула Дж. Физическая химия. М.: Мир, 2007
3. Пригожин И., Дефей Р. Химическая термодинамика. 2-е издание. М.: БИНОМ, 2010.
4. Физическая химия. Под ред. Краснова К.С. т.1,2. 3-е изд., испр. - М.: Высшая школа, 2001
5. Полтораки О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высшая школа, 1991
6. Романовский Б.В. Основы катализа. М.: Бином, 2013
7. Романовский Б.В. Основы химической кинетики. М.: Экзамен, 2006
8. Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа. М.: Академия, 2003
9. Эммануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. 4-е изд. М.: Высшая школа. 1984
10. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. Химия, КолосС, 2008

Дополнительная литература

1. Дуров В. А., Агеев Е. П. Термодинамическая теория растворов. 2-е изд., М.: УРСС Едиториал, 2003
2. Панченков Г.М., Лебедев В.П. Химическая кинетика и катализ. М.: Изд.МГУ, 1961

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

- Журнал «Журнал физической химии» ISSN 0044-4537
- Журнал «Calphad» ISSN 0364-5916
- Журнал «Fluid phase equilibria» ISSN 0378-3812
- Журнал «Materials science and engineering» ISSN 0921-5107
- Журнал «Chemical Physics Letters» ISSN 0009-2614
- Журнал «Thermochimica Acta» ISSN 0040-6031
- Журнал «Catalysis today» ISSN 0920-5861
- Журнал «Molecular catalysis» ISSN 2468-8231
- Журнал «The journal of Chemical Thermodynamics» ISSN 0021-9614

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- ИВТАНТЕРМО <http://www.ihed.ras.ru>, <http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/> .
- NIST <https://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser/>
- SGTE www.sgte.org
- FACTSAGE <http://www.crct.polymtl.ca/fact/fact.htm>
- THERMOCALC <http://www.thermocalc.com>
- MTDATA <http://www.npl.co.uk/mtdata/>
- MALT www.kagaku.com/malt
- HSC www.outotec.com/

- OLI Systems www.olisystems.com/
- PIRIKA <http://www.pirika.com/>
- MEDUSA <http://www.kemi.kth.se/medusa/>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины (При необходимости)

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины: **(ПРИМЕР)**

- компьютерные презентации интерактивных лекций – __, (общее число слайдов – __);
- банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – __);
- банк тестовых заданий для итогового контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – __).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Физическая химия*» проводятся в форме лекционных и практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная электронными средствами демонстрации (компьютер со средствами звуковоспроизведения, проектор, экран) и учебной мебелью, учебная аудитория для проведения практических занятий, оборудованная меловой доской и учебной мебелью.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Презентации лекционного материала.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Для чтения курса лекций имеются компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства; подключение к локальной сети с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине, методические рекомендации к практическим занятиям; раздаточный материал к лекционным курсам; электронные учебные издания, научно-популярные электронные издания.

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционных курсов; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Введение в физическую химию. Основные законы и постулаты физической химии. Математический аппарат.	<i>знает:</i> – основные законы и закономерности, определяющие направление и результат протекания процессов в гомогенных и гетерогенных системах; – способы аналитического описания свойств физико-химических систем; <i>умеет:</i> – формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе физической химии; – получать физико-химические данные, – проводить их математическую обработку, – обобщать полученные результаты, <i>владеет:</i> – простейшими расчетными методами решения физико-химических задач;	Оценка за контрольную работу №1 (5 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (5 семестр)

	– навыками поиска физико-химических данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических химических задач.	
Раздел 2. Приложения химической термодинамики. Растворы. Фазовые и химические равновесия.	<i>знает:</i> – основные законы и закономерности, определяющие направление и результат протекания процессов в гомогенных и гетерогенных системах; – способы аналитического описания свойств физико-химических систем; <i>умеет:</i> – формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе физической химии; – получать физико-химические данные, – проводить их математическую обработку, – обобщать полученные результаты, <i>владеет:</i> – простейшими расчетными методами решения физико-химических задач; – навыками поиска физико-химических данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических химических задач.	Оценка за контрольную работу №2 (5 семестр) Оценка за экзамен (5 семестр)
Раздел 3. Формальная химическая кинетика. Катализ.	<i>знает:</i> – основные законы и закономерности, определяющие направление и результат протекания процессов в гомогенных и гетерогенных системах; – способы аналитического	Оценка за контрольную работу №3 (5 семестр) Оценка за экзамен (5 семестр)

	описания свойств физико-химических систем; <i>умеет:</i> – формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе физической химии; – получать физико-химические данные, – проводить их математическую обработку, – обобщать полученные результаты, <i>владеет:</i> – простейшими расчетными методами решения физико-химических задач; – навыками поиска физико-химических данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных) и применения их при решении практических химических задач.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Химические источники тока»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом Сколковского института науки и инноваций к.т.н.
Фёдоровым Ф. С.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И.
Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Химические источники тока»** относится к части учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений, дисциплин по выбору. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области общей физики, квантовой физики, физической химии.

Цель дисциплины – формирование базовых знаний о видах и способах электрохимического запасаения и преобразования энергии, а также о термодинамических и кинетических соотношениях, определяющих режимы функционирования химических источников тока, наиболее широко применяемых в промышленности, транспорте и в портативных электронных устройствах, а также компетенций, необходимых химикам всех специальностей для решения конкретных задач, связанных с процессами с участием заряженных частиц.

Задачи дисциплины

- изучение теоретических основ функционирования химических источников тока, применяемых в промышленности, транспорте и в портативных электронных устройствах;
- ознакомление с электрохимическими методами определения кинетических и термодинамических параметров электрохимических процессов;
- ознакомление с принципами функционирования современных химических источников тока и перспективами развития направления электрохимического хранения и запасаения энергии.

Дисциплина **«Химические источники тока»** преподается в 7 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Безопасность жизнедеятельности	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.1. Знает основные техносферные опасности, их свойства и характеристики УК-8.2. Знает характер воздействия вредных и опасных факторов на человека и природную среду, методы защиты от них применительно к сфере своей профессиональной деятельности УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	<i>Профессиональный стандарт</i> <i>Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов</i> <i>(утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Корректировка и разработка методик комплексного анализа структуры и свойств наноструктурированных композиционных материалов

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

знать:

- основные термины, понятия и методы экспериментальной электрохимии;
- теоретические соотношения электрохимической термодинамики и кинетики;
- типы химических источников тока, принципы их функционирования и области применения

уметь:

- оценивать термодинамические и кинетические параметры электродных процессов, протекающих в химических источниках тока, обоснованно выбирать соответствующую физическую модель для решения конкретной задачи;
- математически обрабатывать результаты исследования;

владеть:

- методологией подбора методов электрохимического анализа конкретного объекта, методикой его проведения и интерпретации результатов

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	
Самостоятельная работа	1,2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,2	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43,6	32,7
Вид контроля:			
Вид итогового контроля:	зачёт с оц.		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лекции	Прак. зан.	Сам. работа
1	Раздел 1. Обзор электрохимических устройств запасаения и превращения энергии	18	6	6	6
1.1	Введение	6	2	2	2
1.2	Растворы электролитов	6	2	2	2
1.3	Электрохимическая термодинамика	6	2	2	2
2	Раздел 2. Электрохимическая кинетика	36	10	10	16
2.1.	Стадийность электрохимических процессов	7	2	2	3
2.2.	Закономерности стадии переноса заряда	7	2	2	3
2.3.	Закономерности стадии диффузии	7	2	2	3
2.4.	Электрохимические методы	7	2	2	3
2.5.	Гидродинамические методы и спектроскопия импеданса	8	2	2	4
3	Раздел 3. Химические источники тока	54	16	16	22
3.1	Гальванические элементы	7	2	2	3
3.2	Аккумуляторы	7	2	2	3
3.3	Топливные элементы	7	2	2	3
3.4	Конденсаторы и суперконденсаторы	7	2	2	2
3.5	Литий-ионные аккумуляторы их аналоги	14	4	4	6
3.6	Проточные аккумуляторы	7	2	2	3
3.7	Перспективные направления в области запасаения и преобразования электрохимической энергии.	7	2	2	2
	ИТОГО	108	32	32	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Обзор электрохимических устройств запасаения и превращения энергии.

1.1. Предмет исследования электрохимии. Устройства запасаения и преобразования энергии. Практические приложения. «Зеленая» энергетика.

1.2 Растворы электролитов

Электролитическая диссоциация. Сольватация ионов в растворе. Энергия кристаллической решетки и энергия сольватации. Состояние ионов в растворе. Ион-ионные взаимодействия. Коэффициенты активности. Электропроводность растворов. Удельная и эквивалентная электропроводность. Методы измерения электропроводности. Электропроводность при бесконечном разведении и связь с коэффициентом диффузии. Концентрационная зависимость электропроводности.

1.3. Электрохимическая термодинамика

Термодинамика электрохимических систем. Уравнение Нернста. Электродвижущая сила. Расчет величин ЭДС. Электродные потенциалы. Шкала электродных потенциалов. Диффузионный потенциал и мембранные потенциалы. Расчет диффузионного потенциала. Ион-селективные электроды. Расчет ЭДС гальванического элемента.

Раздел 4. Электрохимическая кинетика

4.1 Стадийность электрохимических процессов

Двойной электрический слой и адсорбция. Понятие лимитирующей стадии. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Стадия переноса заряда. Стадия массопереноса. Поляризационные кривые. Смешанная кинетика.

4.2 Закономерности стадии переноса заряда

Уравнение Батлера-Фольмера. Перенапряжение. Константа скорости электрохимической реакции. Ток обмена. Составляющие энергии активации. Коэффициент переноса. Уравнение Тафеля. Примеры процессов, скорость которых контролируется кинетикой межфазного переноса электрона.

4.3 Закономерности стадии диффузии

Механизмы массопереноса. Движущая сила диффузии. Законы Фика. Распределение концентрации реагента вблизи поверхности электрода. Стационарная диффузия. Нестационарная диффузия. Поляризационная кривая в условиях смешанной кинетики.

4.4 Электрохимические методы

Вольтамперометрия. Уравнение Рэндлса-Шевчика. Метод Николсона для расчета констант скорости электрохимических процессов. Микроэлектроды. Хроноамперометрия. Уравнение Коттрелла. Хронопотенциометрия. Электрохимическое кварцевое микровзвешивание.

4.5 Гидродинамические методы и спектроскопия импеданса

Конвекция. Гидродинамические методы. Вращающийся дисковый электрод. Уравнение Левича. Кинетика реакции выделения водорода и реакции восстановления кислорода. Спектроскопия импеданса. Эквивалентные схемы. Расчет кинетических параметров из данных спектроскопии импеданса.

Раздел 5. Химические источники тока

5.1 Гальванические элементы

Первичные и вторичные источники тока. Элемент Даниэля—Якоби. Элемент Лекланше. Элемент Вестона. Цинк-воздушные и алюминий-воздушные элементы. Литиевая батарея.

5.2 Аккумуляторы

Свинцово-кислотный аккумулятор. Никель-кадмиевый аккумулятор. Литий-воздушный аккумулятор. Литий-ионный аккумулятор.

5.3 Топливные элементы

Щелочной топливный элемент. Топливный элемент с протонообменной мембраной. Метанольный топливный элемент. Твердоксидный топливный элемент.

5.4 Конденсаторы и суперконденсаторы

Двойнослойные конденсаторы. Псевдоконденсаторы. Гибридные конденсаторы.

5.5 Литий-ионные аккумуляторы их аналоги

Материалы для литий-ионных аккумуляторов. Электролиты и электролитные добавки. Технологический процесс изготовления литий-ионных аккумуляторов. Срок службы и безопасность литий-ионных аккумуляторов.

5.6 Проточные аккумуляторы

Ванадиевые проточные аккумуляторы. Броматные проточные аккумуляторы. Органические проточные аккумуляторы. Ограничения и преимущества проточных аккумуляторов.

5.7 Перспективные направления в области запасаения и преобразования электрохимической энергии.

Новые материалы для аккумуляторов. Катализаторы для топливных элементов. Новые архитектуры электродов для металл-ионных аккумуляторов. Концепция замкнутого углеродного цикла. Возобновляемая энергетика.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3
	Знать:			
1	– основные термины, понятия и методы экспериментальной электрохимии;	+	+	
2	– теоретические соотношения электрохимической термодинамики и кинетики	+	+	
3	– типы химических источников тока, принципы их функционирования и области применения	+		+
	Уметь:			
4	– оценивать термодинамические и кинетические параметры электродных процессов, протекающих в химических источниках тока, обоснованно выбирать соответствующую физическую модель для решения конкретной задачи;	+	+	
5	– математически обрабатывать результаты исследования	+	+	
	Владеть:			
6	– методологией подбора методов электрохимического анализа конкретного объекта, методикой его проведения и интерпретации результатов	+	+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Универсальные и Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>				
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК		

	УК-8. Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций	УК-8.1. Знает основные техносферные опасности, их свойства и характеристики УК-8.2. Знает характер воздействия вредных и опасных факторов на человека и природную среду, методы защиты от них применительно к сфере своей профессиональной деятельности УК-8.3. Выявляет проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте; предлагает мероприятия по предотвращению чрезвычайных ситуаций	+	+	+
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов ПК-6.3. Владеет типовыми экспериментальными методами для синтеза органических и гибридных соединений с полезными свойствами	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Обзор электрохимических устройств запасаения и превращения энергии	2
2	2	Растворы электролитов	2
3	3	Электрохимическая термодинамика	2
4	4	Стадийность электрохимических процессов	2
5	4	Закономерности стадии переноса заряда	2
6	4	Закономерности стадии диффузии	2
7	4	Электрохимические методы	2
8	4	Гидродинамические методы и спектроскопия импеданса	2
9	5	Гальванические элементы	2
10	5	Аккумуляторы	2
11	5	Топливные элементы	2
12	5	Конденсаторы и суперконденсаторы	2
13	5	Литий-ионные аккумуляторы их аналоги	4
14	5	Проточные аккумуляторы	2
15	5	Перспективные направления в области запасаения и преобразования электрохимической энергии	2

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине «*Химические источники тока*», не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *зачёта с оценкой* (7 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *зачёта с оценкой* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предполагается.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольные работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (7 семестр) составляет 30 баллов за каждую.

Раздел 1. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 3 балла за вопрос.

Вопрос 1.1.

Рассчитайте общую концентрацию оксалата натрия, обеспечивающую равновесную концентрацию оксалат-иона $2 \cdot 10^{-3}$ М при pH 3,00. Для $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$: $K_{a,1} = 5,6 \cdot 10^{-2}$, $K_{a,2} = 5,4 \cdot 10^{-5}$

Вопрос 1.2.

На титрование раствора NaOH, содержащего 4% Na_2CO_3 , в присутствии метилового оранжевого (pT=4,0) израсходовали 25,00 мл стандартного раствора HCl. Какой объем титранта пойдет на титрование этого же раствора NaOH в присутствии фенолфталеина (pT=9,0)? Для H_2CO_3 : $K_{a,1} = 4,5 \cdot 10^{-7}$, $K_{a,2} = 4,8 \cdot 10^{-11}$.

Вопрос 1.3.

Рассчитайте константу равновесия реакции между ионами IO_3^- и I^- в растворе, в котором потенциал водородного электрода равен -0.30 В. При каком значении pH реакция не происходит ($K \leq 1$)? $E_{\text{IO}_3^-/\text{I}_2}^0 = 1.17$ В, $E_{\text{I}_2/2\text{I}^-}^0 = 0.54$ В

Вопрос 1.4

В растворе нужно определить содержание железа (III) и хрома (III). Как это сделать, имея в распоряжении стандартный раствор перманганата калия, серебряный и цинковый редукторы? $E_{\text{AgCl}/\text{Ag}}^0 = 0.22$ В, $E_{\text{Zn}^{2+}/\text{Zn}}^0 = -0.76$ В, $E_{\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}}^0 = 0.77$ В, $E_{\text{Cr}^{3+}/\text{Cr}^{2+}}^0 = -0.41$ В.

Вопрос 1.5.

Ионы серебра, содержащиеся в 25,00 мл пробы, превратили в цианидный комплекс, добавив избыток раствора $\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$. На титрование выделившихся ионов никеля израсходовали 43,70 мл 0,0240 М раствора ЭДТА. Напишите уравнения реакций и рассчитайте концентрацию (г/л) серебра в растворе пробы. Мол. масса Ag – 107,86

Вопрос 1.6.

В 100 мл 0,01 М HNO_3 растворяется $4,00 \cdot 10^{-5}$ г Hg_2Cl_2 . Рассчитайте концентрацию ртути г/л в насыщенном растворе Hg_2Cl_2 в присутствии 0,001 М HCl. Мол. массы: Hg_2Cl_2 - 472,09; Hg - 200,59

Вопрос 1.7.

К раствору, содержащему 0,01753г NaCl в литре, прибавили равный объем раствора Ag_2SO_4 , полученного десятикратным разбавлением насыщенного раствора. Выпадет ли

осадок? Ионной силой пренебречь. $K_s^0 = \{Ag_2SO_4\} = 1,46 \cdot 10^{-5}$; $K_s^0 \{AgCl\} = 1,8 \cdot 10^{-10}$; мол. масса NaCl – 58,44.

Вопрос 1.8.

Изучено распределение кислоты НА между равными объемами воды и нитробензола. Константа распределения кислоты равна 10^3 , а коэффициент распределения при pH 6 – 10^2 . Рассчитайте константу диссоциации кислоты ($K_{a,HA}$). Нарисуйте кривую распределения кислоты и укажите интервал pH, в котором константа распределения равна коэффициенту распределения.

Вопрос 1.9.

Почему растворимость свежесоздаваемых и постоянных в растворах осадков различается?

Вопрос 1.10.

От каких факторов зависит степень извлечения вещества при экстракции?

Раздел 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 6 вопросов, по 5 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

На хроматограмме получены пики при 0,84 мин (неудерживаемый компонент А), при 10,60 мин (компонент В) и 11,08 мин (компонент С). Ширина пиков В и С соответствует 0,56 и 0,59 мин соответственно. Длина колонки – 28,3 см, объем стационарной фазы – 12,3 мл, подвижной фазы – 17,6 мл. Рассчитайте: а) число теоретических тарелок колонки; б) высоту, эквивалентную теоретической тарелке, и укажите, что характеризует эта величина; в) коэффициент удерживания для компонентов В и С; г) коэффициенты распределения компонентов В и С; д) коэффициент селективности и разрешение пиков компонентов В и С. Нарисуйте хроматограмму.

Вопрос 2.2.

При разделении на хроматографической колонке с объемом неподвижной фазы 1,5 мл и объемом удерживания неудерживаемого компонента 2,5 мл, соединения А и В имеют коэффициенты распределения 5,0 и 15,0 соответственно. Эффективность колонки – 20 теоретических тарелок. Рассчитайте, будет ли полным разделение веществ А и В. Какова должна быть эффективность колонки, чтобы получить 6σ-разделение компонентов А и В?

Вопрос 2.3.

Стандартные отклонения хроматографического пика, связанные с некоторыми факторами размытия, составляют 0,0041; 0,0011; 0,0091 и 0,0470 см. Вычислите: а) стандартное отклонение ширины пика; б) эффективность колонки (Н, мкм) длиной 15 см; в) число 13 теоретических тарелок, необходимое для 4σ-разделения двух веществ, если коэффициент селективности равен 1,03.

Вопрос 2.4.

Определите удерживаемый объем н-пентанола, если при 77°C и скорости потока газ-носителя 90 мл/мин на сорбенте Chromaton N AW DMCS, покрытом Carbowax 1500, получены следующие времена удерживания спиртов: метанол – 72,3 с; этанол – 126 с; бутанол – 509 с. Пик неудерживаемого компонента появляется на хроматограмме через 30 с.

Вопрос 2.5.

Нарисуйте схему потокораспределительной системы для проточно-инжекционного анализа. В чем его сущность?

Вопрос 2.6.

Доказано, что результаты анализа подчиняются закону нормального распределения. Какое распределение и какие таблицы вы будете использовать, если число определений равно: а) 5; б) 25; в) 17; г) 50; д) 3?

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (7 семестр – зачёт с оценкой).

Билет включает контрольные вопросы по разделам 1-3 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20- баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

1. Электролитическая диссоциация. Сольватация ионов в растворе. Энергия кристаллической решетки и энергия сольватации. Состояние ионов в растворе. Ион-ионные взаимодействия. Коэффициенты активности. Электропроводность растворов. Удельная и эквивалентная электропроводность. Методы измерения электропроводности. Электропроводность при бесконечном разведении и связь с коэффициентом диффузии. Концентрационная зависимость электропроводности.
2. Термодинамика электрохимических систем. Уравнение Нернста. Электродвижущая сила. Расчет величин ЭДС. Электродные потенциалы. Шкала электродных потенциалов. Диффузионный потенциал и мембранные потенциалы. Расчет диффузионного потенциала. Ион-селективные электроды. Расчет ЭДС гальванического элемента.
3. Двойной электрический слой и адсорбция. Понятие лимитирующей стадии. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Стадия переноса заряда. Стадия массопереноса. Поляризационные кривые. Смешанная кинетика.
4. Уравнение Батлера-Фольмера. Перенапряжение. Константа скорости электрохимической реакции. Ток обмена. Составляющие энергии активации. Коэффициент переноса. Уравнение Тафеля.
5. Механизмы массопереноса. Движущая сила диффузии. Законы Фика. Распределение концентрации реагента вблизи поверхности электрода. Стационарная диффузия. Нестационарная диффузия. Поляризационная кривая в условиях смешанной кинетики.
6. Вольтамперометрия. Уравнение Рэндлса-Шевчика. Метод Николсона для расчета констант скорости электрохимических процессов. Микроэлектроды.
7. Хроноамперометрия. Уравнение Коттрелла. Хронопотенциометрия. Электрохимическое кварцевое микровзвешивание.
8. Конвекция. Гидродинамические методы. Вращающийся дисковый электрод. Уравнение Левича. Кинетика реакции выделения водорода и реакции восстановления кислорода.
9. Спектроскопия импеданса. Эквивалентные схемы. Расчет кинетических параметров из данных спектроскопии импеданса.
10. Первичные и вторичные источники тока. Элемент Даниэля—Якоби. Элемент Лекланше. Элемент Вестона. Цинк-воздушные и алюминий-воздушные элементы. Литиевая батарея.
11. Свинцово-кислотный аккумулятор. Никель-кадмиевый аккумулятор. Литий-воздушный аккумулятор. Литий-ионный аккумулятор.
12. Щелочной топливный элемент. Топливный элемент с протонообменной мембраной. Метанольный топливный элемент. Твердоксидный топливный элемент.
13. Двойнослойные конденсаторы. Псевдоконденсаторы. Гибридные конденсаторы.

14. Материалы для литий-ионных аккумуляторов. Электролиты и электролитные добавки. Технологический процесс изготовления литий-ионных аккумуляторов. Срок службы и безопасность литий-ионных аккумуляторов.

15. Ванадиевые проточные аккумуляторы. Броматные проточные аккумуляторы. Органические проточные аккумуляторы. Ограничения и преимущества проточных аккумуляторов.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (7 семестр).

Зачёт с оценкой по дисциплине «Химические источники тока» проводится в 7 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-3 рабочей программы дисциплины. Билет для **зачёта с оценкой** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **зачёта с оценкой**:

«Утверждаю» _____ (Должность, наименование кафедры) _____ (Подпись) _____ (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия Профиль – Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии
	Химические источники тока
Билет № _ 1. Конвекция. Гидродинамические методы. Вращающийся дисковый электрод. Уравнение Левича. Кинетика реакции выделения водорода и реакции восстановления кислорода 2. Двойнослойные конденсаторы. Псевдоконденсаторы. Гибридные конденсаторы	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

- Багоцкий В.С. Основы электрохимии. – М.: Химия, 1988. – 400 с.
- Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. М.: Химия, 2001. – 624 с.
- Миомандр Ф., Садки С., Одебер П., Меалле-Рено Р. М.: Техносфера, 2008. – 360 с.

Б. Дополнительная литература

- Compton, R.G. Understanding voltammetry. World Scientific, 2007. – 371 с.
- Schmickler, W., Santos, E. Interfacial electrochemistry. Springer, 2010. – 273 с.
- Huggins, R. Advanced batteries. Springer, 2009. – 504 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Научно-технические журналы:
 - Журнал «Электрохимия» ISSN 0424-8570
 - Журнал «Electrochimica Acta» ISSN 0013-4686
 - Журнал «Journal of Power Sources» ISSN 0378-7753
- Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:
 - <https://electrochemistry.uoregon.edu/resources/>
 - <https://knowledge.electrochem.org/>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины (При необходимости)

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

- сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные

периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Химические источники тока»* проводятся в форме лекционных и семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Обзор электрохимических устройств запасаения и превращения энергии	<i>знает:</i> – основные термины, понятия и методы экспериментальной электрохимии; – теоретические соотношения электрохимической термодинамики и кинетики; – типы химических источников тока, принципы их функционирования и области применения; <i>умеет:</i> – оценивать термодинамические и кинетические параметры электродных процессов, протекающих в химических источниках тока, обоснованно выбирать соответствующую физическую модель для решения конкретной задачи; – математически обрабатывать результаты исследования; <i>владеет:</i> – методологией подбора методов электрохимического анализа конкретного объекта, методикой его проведения и интерпретации результатов;	Оценка за контрольную работу №1 (7 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (7 семестр)
Раздел 2. Электрохимическая кинетика	<i>знает:</i> – теоретические соотношения электрохимической термодинамики и кинетики; – типы химических источников тока, принципы их функционирования и области применения; <i>умеет:</i> – оценивать термодинамические и кинетические параметры электродных процессов, протекающих в химических источниках тока, обоснованно выбирать соответствующую физическую модель для решения конкретной задачи; – математически обрабатывать результаты исследования;	Оценка за контрольную работу №2 (7 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (7 семестр)

	<i>владеет:</i> – методологией подбора методов электрохимического анализа конкретного объекта, методикой его проведения и интерпретации результатов;	
Раздел 3. Химические источники тока	<i>знает:</i> – типы химических источников тока, принципы их функционирования и области применения;	Оценка за <i>зачёт</i> (7семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Химические проблемы окружающей среды»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

(Код и наименование направления подготовки)

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

(Наименование профиля подготовки)

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом Кафедры химической технологии основного органического и нефтехимического синтеза Староверовым Д. В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Химические проблемы окружающей среды»** относится к обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области неорганической и органической химии.

Цель дисциплины – сформировать у студентов представление о современных экологических проблемах, о физико-химических процессах, протекающих в различных компонентах окружающей среды и о степени антропогенного воздействия на эти процессы; выработать у студентов навыки системного подхода к изучению и решению экологических проблем, возникших в результате промышленно-хозяйственной деятельности человека, развить мышление, позволяющее правильно оценивать локальные и отдаленные последствия принимаемых решений для окружающей среды и человека.

Задачи дисциплины

- сформировать основные понятия и принципы концепции устойчивого развития;
- ознакомить с основными сведениями о глобальной проблематике, природных ресурсах, планетарных границах, антропогенном воздействии на окружающую среду;
- приблизиться к совершенствованию управлением качества окружающей среды;

Дисциплина **«Химические проблемы окружающей среды»** преподается в 6 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы)	Код и наименование УК, ПК	Код и наименование индикатора достижения УК, ПК
Системное и критическое мышление	УК-8. Способен создавать и поддерживать в повседневной жизни и в профессиональной деятельности безопасные условия жизнедеятельности для сохранения природной среды, обеспечения устойчивого развития общества, в том числе при	. УК-8.1. Знает основные техносферные опасности, их свойства и характеристики. УК-8.2. Знает характер воздействия вредных и опасных факторов на человека и природную среду, методы защиты от них применительно к сфере своей профессиональной деятельности.

	угрозе и возникновении чрезвычайных ситуаций и военных конфликтов	УК-8.3. Умеет обеспечивать безопасные и/или комфортные условия труда на рабочем месте, в том числе с помощью средств защиты. УК-8.4. Умеет выявлять и устранять проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте применительно к сфере своей профессиональной деятельности. УК-8.5. Умеет осуществлять действия по предотвращению чрезвычайных ситуаций.
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные законы общей экологии;
- закономерности строения и функционирования биосферы; современные экологические проблемы;
- основы рационального природопользования;
- основные принципы защиты природной среды от антропогенных воздействий; строение основных геосфер Земли и основные физико-химические процессы, протекающие в них;
- основные понятия и принципы концепции устойчивого развития;
- основные сведения о глобальной проблематике, природных ресурсах, планетарных границах, антропогенном воздействии на окружающую среду, управлении качеством окружающей среды;
- принципы зеленой химии;

Уметь:

- применять полученные знания для оценки состояния окружающей среды и рационального использования природных ресурсов;
- использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных для решения конкретных экологических проблем;

Владеть:

- понятийным аппаратом в области общей экологии, рационального использования природных ресурсов и защиты окружающей среды.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,78	64	48,15
Лекции	0,89	32	24
Практические занятия (ПЗ)	0,89	32	24
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,22	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,22	0,2	0,15
Самостоятельное изучение разделов		43,8	32,85
Вид итогового контроля:	Зачёт		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов								
		Всего	в т.ч. в форме пр. подг. (при наличии)	Лекции	в т.ч. в форме пр. подг. (при наличии)	Прак. зан.	в т.ч. в форме пр. подг. (при наличии)	Лаб. работы	в т.ч. в форме пр. подг. (при наличии)	Сам. работа
1.	Раздел 1. Общие вопросы экологии.	14		4		4				6
1.1	Понятие об экосистемах.	7		2		2				3
1.2	Биогеохимические циклы	7		2		2				3
2.	Раздел 2. Строение и состав геосфер Земли. Основные физико-химические процессы, протекающие в геосферах	21		6		6				9
2.1	Атмосфера Земли.	7		2		2				3
2.2	Гидросфера Земли	7		2		2				3
2.3	Литосфера Земли.	7		2		2				3
3.	Раздел 3. Химические производства - наиболее опасные для окружающей среды.	14		4		4				6
3.1	Химические производства и окружающая среда.	14		4		4				6
4.	Раздел 4. Принципы зеленой химии:	39		12		12				15
4.1	Утилизация отходов	13		4		4				5
4.2	Планирование химического производства	13		4		4				5

4.3	Аналитические методики химических производств.	13		4		4				5
5.	Раздел 5. Перспективы дальнейшего развития и совершенствования химических технологий, обеспечивающие устойчивое развитие мировой цивилизации.	20		6		6				8
5.1.	Развитие химических технологий	20		6		6				8
	ИТОГО	208		32		32				44
	Экзамен	-								
	ИТОГО	208								

4.2 Содержание разделов дисциплины

Введение. Мировое сообщество признает скорейшее решение проблем охраны окружающей среды в качестве главных приоритетов в дальнейшем развитии. Глобальные изменения идеологии проектирования и конкретной реализации химических производств становятся первостепенными задачами химической промышленности.

Раздел 1. Общие вопросы экологии.

Биоэкология. Понятие об экосистемах. Устойчивость экосистем Биосфера, ее эволюция и устойчивость. Экосистемы Земли и устойчивость. Основные сведения о планете Земля. Основные понятия экологии. Законы и принципы экологии. Потоки энергии и вещества в экосистемах. Основные биогеохимические циклы (круговороты веществ). Цикличность процессов в биосфере и устойчивость.

Раздел 2. Строение и состав геосфер Земли. Основные физико-химические процессы, протекающие в геосферах

2.1 Атмосфера Земли. Строение атмосферы, роль фотохимических реакций в формировании состава атмосферы. Парниковый эффект. Парниковые газы в атмосфере. Климатические последствия антропогенной деятельности. Распределение концентрации озона в атмосфере. Озоновый слой. Природный цикл озона. Современное состояние озонового слоя. Последствия разрушения озонового слоя Земли для человека и биосферы в целом. Стратосферный озон и тропосферный озон: сходство и различия. Международное сотрудничество в области ограничения производства и использования озоноразрушающих веществ. Монреальский протокол. Кислотные дожди и процессы окисления примесей в тропосфере. Фотохимический смог.

2.2 Гидросфера Земли. Виды вод на Земле. Пресные воды.

Гидрологический цикл. Глобальные экологические проблемы гидросферы. Главные катионы и анионы природных вод. Кислотно-основное равновесие в природных водах. Щелочность природных вод. Основные причины, этапы и последствия закисления природных водоемов. Окислительно-восстановительные процессы в природных водоемах. Стратификация природных водоемов. Процессы эвтрофикации водоемов. Причины и последствия.

2.3 Литосфера Земли.

Земная кора. Почва. Строение почвенного слоя. Состав почв. Органические вещества в почве. Роль живых организмов в формировании почвенного слоя. Тяжелые металлы в почве. Деградация почв. Водная и ветровая эрозия почв.

Раздел 3. Химические производства - наиболее опасные для окружающей среды.

Пути воздействия химических производств на окружающую среду. Принципиальные схемы действующих химических производств: наличие замкнутых циклов,

- нефтехимическое производства
- , коксохимическое и нефтехимическое производства
- производство неорганических веществ (кислот, минеральных удобрений)
- целлюлозно-бумажная промышленность
- анилиноокрасочная промышленность
- производство полимерных веществ и материалов

Раздел 4. Принципы зеленой химии:

1. Следует предотвращать выброс загрязнений, чем утилизировать отходы.
2. Химические производства должны основываться на атомно-экономных схемах.

3. Следует планировать химическое производство так, чтобы реагенты и конечные продукты были малотоксичны для человека и природы.
4. Среди целевых химических веществ следует выбирать такие, которые наряду с требуемыми свойствами, обладают низкой токсичностью.
5. Следует избегать или минимизировать использование в синтезе вспомогательных веществ (например, растворителей).
6. При планировании химического производства следует минимизировать затраты энергии и стремиться к их проведению при температуре окружающей среды и нормальном давлении.
7. Следует использовать возобновляемое сырье там, где это технически и экономически обосновано.
8. Необходимо сокращать число стадий процесса и добиваться максимального выхода продукта.
9. Предпочтительнее использовать каталитические процессы, чем реакции, требующие стехиометрического количества всех реагентов.
10. Для проведения химических процессов следует использовать биodeградируемые реагенты.
11. Аналитические методики химических производств следует развивать так, чтобы в режиме реального времени обеспечивать мониторинг продуктов реакции.
12. При разработке химических процессов следует максимально упрощать процедуры синтеза и выделения, стремясь свести к минимуму возможные аварии, взрывы или выбросы вредных веществ.

Раздел 5. Перспективы дальнейшего развития и совершенствования химических технологий, обеспечивающие устойчивое развитие мировой цивилизации.

Понятие об устойчивом развитии. История становления понятия. Вклад отечественных ученых. Цели устойчивого развития ООН. Международное сотрудничество в области устойчивого развития. Промышленная экология и зеленая химия как инструмент обеспечения устойчивого развития. Ранжирование химических технологий с точки зрения их влияния на окружающую среду. Экологическая этика

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5
	Знать:						
1	- основные законы общей экологии;		+				
2	- закономерности строения и функционировании биосферы; современные экологические проблемы;			+			
3	- основы рационального природопользования;						
4	- основные принципы защиты природной среды от антропогенных воздействий; строение основных геосфер Земли и основные физико-химические процессы, протекающие в них;				+	+	+
5	- основные понятия и принципы концепции устойчивого развития;				+	+	+
6	- основные сведения о глобальной проблематике, природных ресурсах, планетарных границах, антропогенном воздействии на окружающую среду, управлении качеством окружающей среды;					+	+
7	- принципы зеленой химии;					+	+
	Уметь:						
8	- применять полученные знания для оценки состояния окружающей среды и рационального использования природных ресурсов;		+	+	+	+	+
9	- использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных для решения конкретных экологических проблем;					+	+
	Владеть:						
10	- понятийным аппаратом в области общей экологии, рационального использования природных ресурсов и защиты окружающей среды.		+	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>универсальные и общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>							
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК					
11	УК-8. Способен создавать и поддерживать в повседневной жизни и в	УК-8.1. Знает основные техносферные опасности, их свойства и характеристики.				+	+

12	профессиональной деятельности безопасные условия жизнедеятельности для сохранения природной среды, обеспечения устойчивого развития	УК-8.2. Знает характер воздействия вредных и опасных факторов на человека и природную среду, методы защиты от них применительно к сфере своей профессиональной деятельности.	+	+	+		
13	общества, в том числе при угрозе и возникновении чрезвычайных ситуаций и военных конфликтов	УК-8.3. Умеет обеспечивать безопасные и/или комфортные условия труда на рабочем месте, в том числе с помощью средств защиты.				+	+
14		УК-8.4. Умеет выявлять и устранять проблемы, связанные с нарушениями техники безопасности на рабочем месте применительно к сфере своей профессиональной деятельности.				+	+
15		УК-8.5. Умеет осуществлять действия по предотвращению чрезвычайных ситуаций.				+	
16	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	+	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Биоэкология. Понятие об экосистемах. Устойчивость экосистем	2
2	2	Атмосфера Земли. Строение атмосферы, роль фотохимических реакций в формировании состава атмосферы	2
3	2	Гидросфера Земли Виды вод на Земле	2
4	2	Стратификация природных водоемов	2
5	2	Литосфера Земли	2
6	3	Экологические проблемы нефтехимического производства	2
7	3	Экологические проблемы коксохимического производства	2
8	3	Экологические проблемы производства неорганических веществ	2
9	3	Экологические проблемы анилинокрасочной промышленности	2
10	3	Экологические проблемы - производства полимерных веществ и материалов	2
11	4	Принципы зеленой химии	2
12	4	Пути воздействия химических производств на окружающую среду	2
13	5	Замкнутые циклы в промышленности	2
14	5	Перспективы зеленой энергетики	2
15	5	Экологические проблемы использования тяжелых металлов	2
16	5	Перспективы развития зеленой химии	2

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает: ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;

- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с

указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 90 баллов) и написания реферата (максимальная оценка 10 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

1. Биозкология. Понятие об экосистемах. Устойчивость экосистем.
2. Строение и состав геосфер Земли.
3. Атмосфера Земли. Строение атмосферы, роль фотохимических реакций в формировании состава атмосферы.
4. Гидросфера Земли. Виды вод на Земле
5. Окислительно-восстановительные процессы в природных водоемах.
6. Стратификация природных водоемов
7. Литосфера Земли
8. Опасность нефтехимических производств для окружающей среды
9. Опасность производств анилиноокрасочной промышленности
10. Опасность полимерных веществ и материалов для окружающей среды

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1,2 и 3 (6 семестр) составляет 30 баллов за каждую.

Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

Вопрос 1.1.

Цикличность процессов в биосфере и устойчивость

Вопрос 1.2.

Глобальные экологические проблемы гидросферы.

Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

Вопрос 2.1.

Экологические проблемы производства полимеров

Вопрос 2.2.

Перспективы зеленой энергетики

Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

Вопрос 3.1.

Преимущества использования возобновляемого сырья

Вопрос 3.2.

Сокращение числа стадий производственных процессов

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины

Итоговый контроль по дисциплине не предусмотрен.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

- 1.Белопухов, С.Л. Химия окружающей среды [Текст] : учебное пособие / С.Л. Белопухов, Н.К. Слюняев, М.В. Тютюнькова; под общ. ред. проф. С.Л. Белопухова. - М.: Изд-во "Проспект", 2016. - 240 с.
- 2.Топалова, О.В. Химия окружающей среды [Текст] : учебное пособие / О.В. Топалова, Л.А. Пимнева. – СПб: Изд-во "Лань", 2013. – 160 с.

Б. Дополнительная литература

- 1.Голдовская, Л.Ф. Химия окружающей среды [Текст] : учебник / Л.Ф. Голдовская. - 3-е изд. - М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. - 295 с.
2. Трифонов, К.И. Физико-химические процессы в техносфере [Текст]: учебник / К.И. Трифонов, В.А. Девисилов. - 2-е изд., испр. и доп. - М.: Форум : ИНФРА-М, 2015. - 256 с.
3. Улахович, Н.А. Экоотоксиканты [Текст] : учебно-методическое пособие для лекционного курса "Химия в экологии" / Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Э.П. Медянцева, С.С. Бабкина. - Казань: Изд-во Казанского гос. ун-та, 2010. – 56 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

- ACS Nano. ISSN: 1936-0851, 1936-086X
- Computational Materials Science. ISSN: 0927-0256
- Advanced Composite Materials. ISSN: 1568-5519
- Advanced Materials. ISSN: 1521-4095
- Chemistry of Materials. ISSN: 1520-5002
- Crystal Growth & Design. ISSN: 1528-7505
- Journal of Applied Crystallography. ISSN: 1600-5767
- Nature Materials. ISSN: 1476-4660
- Journal of the American Ceramic Society. ISSN: 1551-2916
- European Journal of Glass Science and Technology. Part A. ISSN: 1753-3546

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации интерактивных лекций – 16, (общее число слайдов – 200);

– банк тестовых заданий для текущего контроля освоения дисциплины (общее число вопросов – 300);

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Химические проблемы окружающей среды»* проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Общие вопросы экологии.	<i>Знает:</i> – основные законы общей экологии; <i>Умеет:</i> – применять полученные знания для оценки состояния окружающей среды и рационального использования природных ресурсов; <i>Владеет:</i> – понятийным аппаратом в области общей экологии, рационального использования природных ресурсов и защиты окружающей среды.	Оценка за контрольную работу №1 (6 семестр)
Раздел 2. Строение и состав геосфер Земли. Основные физико-химические процессы, протекающие в геосферах	<i>Знает:</i> – закономерности строения и функционирования биосферы; современные экологические проблемы; <i>Умеет:</i> – применять полученные знания для оценки состояния окружающей среды и рационального использования природных ресурсов; <i>Владеет:</i> – понятийным аппаратом в области общей экологии, рационального использования природных ресурсов и защиты окружающей среды.	Оценка за контрольную работу №1 (6 семестр)
Раздел 3. Химические производства - наиболее опасные для окружающей среды.	<i>Знает:</i> – основные принципы защиты природной среды от антропогенных воздействий; строение основных геосфер Земли и основные физико-химические процессы, протекающие в них; – основные понятия и принципы концепции устойчивого развития; <i>Умеет:</i> – применять полученные знания для оценки состояния окружающей среды и рационального использования природных ресурсов; <i>Владеет:</i> – понятийным аппаратом в области общей экологии, рационального использования природных ресурсов и защиты окружающей среды.	Оценка за контрольную работу №2 (6 семестр)

Раздел 4. Принципы зеленой химии:	<i>Знает:</i> – основные принципы защиты природной среды от антропогенных воздействий; строение основных геосфер Земли и основные физико-химические процессы, протекающие в них; – основные понятия и принципы концепции устойчивого развития; – основные сведения о глобальной проблематике, природных ресурсах, планетарных границах, антропогенном воздействии на окружающую среду, управлении качеством окружающей среды; – принципы зеленой химии; <i>Умеет:</i> – применять полученные знания для оценки состояния окружающей среды и рационального использования природных ресурсов; – использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных для решения конкретных экологических проблем; <i>Владеет:</i> – понятийным аппаратом в области общей экологии, рационального использования природных ресурсов и защиты окружающей среды.	Оценка за контрольную работу №3 (6 семестр)
Раздел 5. Перспективы дальнейшего развития и совершенствования химических технологий, обеспечивающие устойчивое развитие мировой цивилизации.	<i>Знает:</i> – основные принципы защиты природной среды от антропогенных воздействий; строение основных геосфер Земли и основные физико-химические процессы, протекающие в них; – основные понятия и принципы концепции устойчивого развития; – основные сведения о глобальной проблематике, природных ресурсах, планетарных границах, антропогенном воздействии на окружающую среду, управлении качеством окружающей среды; – принципы зеленой химии; <i>Умеет:</i> – применять полученные знания для оценки состояния окружающей среды и рационального использования природных ресурсов; – использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных для решения конкретных экологических проблем;	Оценка за контрольную работу №3 (6 семестр)

	<i>Владеет:</i> – понятийным аппаратом в области общей экологии, рационального использования природных ресурсов и защиты окружающей среды.	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Химия координационных соединений»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры Сколтеха к.х.н. С. Д. Токаревым

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И.
Менделеева «26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направления подготовки **04.03.01 Химия**, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина «**Химия координационных соединений**» относится к формируемой участниками образовательных отношений части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области неорганической химии, имеют начальные знания по физике, органической и физической химии.

Цель дисциплины – создание основы для понимания химии координационных соединений при последующем изучении как базовых, так и специализированных дисциплин, в которых широко применяются координационные соединения.

Задачи дисциплины – обучающийся должен получить базовые знания

- об используемых в химии координационных соединений;
- о моделях описания химической связи, строения, реакционной способности, специфических свойств координационных соединений;
- о современных методах исследования и направлениях применения координационных соединений.

Дисциплина «**Химия координационных соединений**» преподается в 3 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения**:

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Представление результатов профессиональной деятельности	ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.	ОПК-4.1 Использует базовые знания в области математики и физики при планировании работ химической направленности; ОПК-4.3 Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений.

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- основные термины и понятия химии координационных соединений; современные теории их описания;
- номенклатуру координационных соединений;
- основные направления, особенности и успехи применения координационных соединений

Уметь:

- планировать синтез простых координационных соединений
- предсказывать физико-химические свойства, строение и реакционную способность координационных соединений на основе их формул;

Владеть:

- приемами синтеза, основными методами исследования строения и свойств координационных соединений.

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,2	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43,6	32,7
Вид итогового контроля:	зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лек- ции	Прак. зан.	Сам. рабо- та
	Раздел 1. Общие положения и строение КС	21	6	6	9
1.1	Общие положения	7	2	2	3
1.2	Ионно-ковалентные и электростатические модели связи	7	2	2	3
1.3	Квантово-механические модели связи и строения	7	2	2	3
	Раздел 2. Свойства КС	14	4	4	6
2.1	Геометрия и стереохимия КС	7	2	2	3
2.2	Устойчивость КС	7	2	2	3
	Раздел 3. Реакции КС и влияние среды	49	14	12	21
3.1	Реакционная способность КС	7	2	2	3
3.2	Реакции замещения лигандов и кислотно-основные превращения.	14	4	2	6
3.3	Механизмы окислительно-восстановительных реакций	7	2	2	3
3.4	Эффекты растворителя и механизмы гетерогенных реакций.	7	2	2	3
3.5	Стабилизация состояний окисления	7	2	2	3
3.6	Комплексы смешанной валентности	7	2	2	3
	Раздел 4. Разработка и изучение современных КС	24	8	10	8
4.1	Дизайн координационных соединений	6	2	2	2
4.2	Физико-химические методы исследования	6	2	2	2
4.3	Направления и особенности применения координационных соединений	12	4	6	4
	ИТОГО	108	32	32	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Общие положения и строение координационных соединений

1.1 Общие положения.

Место координационной химии в современной химии. Классификация координационных соединений Терминология химии координационных соединений (КС), номенклатура, Координационная теория Вернера. Классификация координационных соединений: по типу центрального атома, по заряду КС, по устойчивости, по характеру координируемых лигандов (ацидокомплексы, гидроксокомплексы, амины и аммиакаты, комплексы с биолигандами, сверхкомплексы), по типу комплексов (алкоголяты, бета-дикетонаты, хелаты, комплексонаты, комплексы с криптандами, краун-эфирами, изополи- и тереполисоединения), полиядерные комплексы, по характеру связывания (КС с

радикальными лигандами, КС с сигма-связью, ферроцен, аллильные и ареновые комплексы, ацетиленовые комплексы, порфириновые и фталоцианиновые КС – гемоглобин, хлорофилл).

1.2 Ионно-ковалентные и электростатические модели связи

Ионная связь, ковалентная связь, размер ионов, ионные и кристаллические радиусы, концепция эффективного атомного номера, энергии кристаллической решетки, теория отталкивания электронных пар валентной оболочки, алгоритм расчета по теории Гиллеспи, ограничения модели Гиллеспи, достоинства и недостатки электростатических теорий, классическая теория химического строения, постулаты классической теории, критерий существования молекулы, валентность.

1.3 Квантово-механические модели связи и строения.

Метод валентных схем (валентных связей), достоинства и недостатки МВС, теория кристаллического поля, предпосылки и основные положения ТКП. Слабое, сильное и промежуточное кристаллические поля, энергия стабилизации кристаллическим полем, теория поля лигандов, ковалентность центрального поля, нефелоксетический эффект, спектрохимический ряд лигандов, рамки применимости ТКП-ТПЛ, неэмпирические методы.

Раздел 2. Свойства координационных соединений.

2.1. Геометрия и стереохимия координационных соединений.

Изомерия КС: геометрическая, ионная, сольватная, координационная, координационная полимерия, структурная (солевая), изомерия координационного положения, конформационная, оптическая изомерия. Оптическая активность и хиральность. Геометрия КС и форма полиэдра. Факторы, влияющие на геометрию координационного полиэдра. Строение КС непереходных элементов. Координационные полиэдры, запрещенные по симметрии. Эффекты Яна-Теллера, геометрия координационных полиэдров и их форма, факторы, влияющие на их строение, стерические эффекты, природа центрального атома, природа лиганда, структура координационных соединений непереходных элементов, стереохимически нежесткие комплексы.

2.2 Устойчивость координационных соединений.

Комплексные соединения в растворах, константы устойчивости, прямая и обратная задачи теории химических равновесий в растворе, константы устойчивости: математическое моделирование, энтальпийный и энтропийный вклады в константу, закономерности в устойчивости координационных соединений, редкоземельные элементы, тетрад-эффект, комплексы d-переходных и непереходных металлов, внешнесферные катионы и устойчивость твердых комплексных соединений, модель «взаимного влияния», термическая устойчивость комплексных соединений

Раздел 3. Реакции координационных соединений и влияние среды

3.1 Реакционная способность КС

Описание реакционной способности. Общее теоретическое описание химического взаимодействия. Свойства потенциальных поверхностей. Симметрия и направление реакций.

3.2 Реакции замещения лигандов и кислотно-основные превращения.

Правило Пейроне-Иоргенсена. Определение и терминология, механизм взаимного влияния. Цис- и трансвлияние. Ряд трансвлияния. Комплексы платины (II). Кислотно-основные свойства комплексных соединений, теория Льюиса, теория жестких и мягких кислот и оснований, процессы замещения лигандов; лабильность и инертность комплексов, механизмы нуклеофильного замещения лигандов S_N1 и S_N2 , классификация комплексов по механизмам замещения; активационные параметры реакции; замещение в квадратных комплексах, замещение в октаэдрических комплексах, динамическое трансвлияние.

3.3 Механизмы окислительно-восстановительных реакций.

Классификация окислительно-восстановительных реакций, внешнесферный механизм, теория Маркуса-Хаша, перекрёстное соотношение Маркуса, внутрисферный механизм, скорость лимитируется образованием мостика, скорость лимитируется стадией переноса электрона в мостиковом интермедиате, перенос электрона к мостиковой связи, эффекты взаимного влияния, различение внутри- и внешнесферных механизмов, специальные окислительно-восстановительные реакции.

3.4 Эффекты растворителя и механизмы гетерогенных реакций.

Влияние среды на скорость химических реакций, классификация растворителей, координационные свойства растворителей, образование комплексов в растворе, ионизация и диссоциация сольватных комплексов, описание редокс реакций в растворителе, взаимодействие ионов с растворителем, перенос электрона, реакции перезарядки, реакции с изменением координационной сферы, о механизмах гетерогенных реакций, классификация гетерогенных химических реакций, специфика координационных соединений.

3.5 Стабилизация состояний окисления.

Стабилизация состояний окисления при координации, растворы: решение прямой задачи стабильности, твёрдое состояние: решение обратной задачи стабильности, специфика «окислительно-восстановительной устойчивости», классификация окислительных состояний, влияние природы центрального иона, влияние природы лигандов, соотношения свойств центрального атома и лигандов, стабилизация состояний окисления кристаллической решеткой;

3.6 Комплексы смешанной валентности.

Проблема смешанной валентности, классификация смешанновалентных систем, окраска и электронная спектроскопия смешанно-валентных соединений, классическое описание, модели «двух-четырёх состояний», о временах наблюдения и переноса электрона, смешанновалентные кристаллические соединения, волны зарядовой плотности, эффект диспропорционирования электронной плотности в растворах.

Раздел 4. Современные координационные соединения.

4.1 Дизайн координационных соединений

Типы химического дизайна, молекулярное моделирование, молекулярный дизайн координационных соединений с органическими лигандами, молекулярные «библиотеки», супрамолекулярные и координационные соединения, от молекулярного к кристаллохимическому дизайну, принципы самосборки и самоорганизации, дизайн высокотемпературных сверхпроводников, дизайн перовскитоподобных систем, дизайн других твёрдых соединений.

4.2 Физико-химические методы исследования

Теоретические проблемы, экспериментальные проблемы, проблемы идентификации и анализа, установление химической индивидуальности комплексов, методические особенности исследования растворных систем, методические особенности исследования твердых комплексов, методы определения состояний окисления центрального иона, химические методы, физические методы идентификации состояний окисления.

4.3 Направления и особенности применения координационных соединений

КС для фотоники, создания новых материалов, медицинских применений, катализа, бионеорганической химии, красители и пигменты, гидрометаллургия и другие технологические области. Подбор и модификация органических лигандов, макроциклы, рецепторы, порфирины, фталоцианины и т.д. Кислород-, азот-, фосфор- и серусодержащие лиганды. Близкие к применению координационные соединения с органическими лигандами. Комплексы рутения (II). Обзор избранных научных публикаций за последние 5 лет.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЯМ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	– основные термины и понятия химии координационных соединений; современные теории их описания;	+	+	+	+
2	– номенклатуру координационных соединений.	+			
3	– основные направления, особенности и успехи применения координационных соединений				+
	Уметь:				
4	– планировать синтез простых координационных соединений			+	+
5	– предсказывать физико-химические свойства, строение и реакционную способность координационных соединений на основе их формул;		+	+	+
	Владеть:				
6	– приемами синтеза, основными методами исследования строения и свойств координационных соединений.	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <i>профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</i>					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			
11	ПК-6. Способен проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-6.1. Знает и может применять на практике современные экспериментальные методы для установления структуры органических соединений ПК-6.2. Способен изучать реакционную способность органических соединений с применением типовых экспериментальных и расчётных методов	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Общие положения	2
2	1	Ионно-ковалентные и электростатические модели связи	2
3	1	Квантово-механические модели связи и строения	2
4	2	Геометрия и стереохимия КС	2
5	2	Устойчивость КС	2
6	3	Реакционная способность КС	2
7	3	Реакции замещения лигандов и кислотно-основные превращения.	2
8	3	Механизмы окислительно-восстановительных реакций	2
9	3	Эффекты растворителя и механизмы гетерогенных реакций.	2
10	3	Стабилизация состояний окисления	2
11	3	Комплексы смешанной валентности	2
12	4	Дизайн координационных соединений	2
13	4	Физико-химические методы исследования	2
14	4	Направления и особенности применения координационных соединений	6

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине «Химия координационных соединений» не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *зачёта* (3 семестр).

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *Зачёте с оценкой* (максимальная оценка 40 баллов).

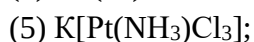
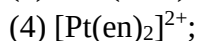
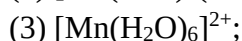
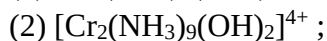
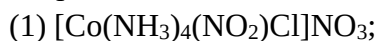
8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено две контрольные работы. Максимальная оценка за контрольные работы составляет по 30 баллов за каждую.

Примеры вопросов к контрольной работе № 1 Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 3 балла за вопрос.

Вопрос 1.1.

Назовите в соответствии с требованиями современной номенклатуры следующие координационные соединения:



Следующим комплексным соединениям припишите химическую формулу:

(1) 14-хлорогексамолибден;

(2) тетракарбонилникель;

(3) дихлоро-бис(пиридин) цинк;

(4) катион додекахлорогексаниобия (1+);

(5) хлорид(μ-амидо)-декаамминдикобальта(III) или
хлорид(μ-амидо)бис(пентаамминкобальта (III));

Вопрос 1.2.

Как известно, группа NO_2^- стремится вступить в «неионогенное сочетание» с кобальтом. Предположите состав продукта, если на $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{CO}_3]\text{X}$ подействовать раствором нитрита натрия в азотнокислом растворе (этот продукт сыграл важную роль в развитии химии комплексных соединений; получен С. М. Иоргенсеном в 1894 г.).

Вопрос 1.3.

Оцените по Гиллеспи строение следующих пар молекул: (а) CH_4 , NH_3 ; (б) SOF_4 , SOCl_4 ; (в) Cl_2O , H_2O . Определите, какой из углов $\text{L}-\text{Э}-\text{L}$ в каждой из пар больше.

Вопрос 1.4

Нарисуйте диаграммы, показывающие расщепление следующих орбитальных наборов в октаэдрическом кристаллическом поле: s , p , d и f . Что определяет вероятное расщепление набора g -орбиталей?

Вопрос 1.5.

Какие $d-d$ -переходы возможны в спектре поглощения комплексов CuL_6^{2+} , FeL_6^{2+} ?

Вопрос 1.6.

Нарисуйте строение возможных геометрических изомеров для комплекса состава $[\text{Pt}(\text{en})\text{NH}_3\text{NO}_2\text{Cl}_2]\text{X}$. Для комплекса $[\text{Co}(\text{en})_2(\text{C}_2\text{O}_4)]\text{X}$ определите возможность оптической изомерии и нарисуйте геометрическое строение соответствующих изомеров.

Вопрос 1.7.

В 1948 г. Ф.Басоло получил соединения Co(III) с азотсодержащим четырехдентатным лигандом *trien* $[\text{NH}_2(\text{CH}_2)_2 \text{NH}(\text{CH}_2)_2 \text{NH}(\text{CH}_2)_2 \text{NH}_2]$ и двумя ацидоионами (Cl^- , NO_2^-)

общего состава $[\text{Co}(\text{trien})\text{X}_2]$. Нарисуйте строение всех возможных стереоизомерных форм.

Вопрос 1.8.

Как определяется термин «валентные атомные орбитали»?

Вопрос 1.9.

Логарифмы ступенчатых констант образования комплексных аммиаков никеля составляют: $\lg K_1 = 2,67$, $\lg K_2 = 2,12$, $\lg K_3 = 1,61$, $\lg K_4 = 1,07$, $\lg K_5 = 0,63$, $\lg K_6 = -0,09$. (а) Объясните причину систематического уменьшения значений $\lg K_n$. (б) Рассчитайте изменение стандартной свободной энергии для реакции образования гексааммиаката и полную константу устойчивости. (в) определите константы устойчивости системы $\text{Ni}-\text{NH}$ при условии, что в системе содержится двойной избыток молекул аммиака от стехиометрии. (г) Логарифмы ступенчатых констант устойчивости этилендиаминовых комплексов никеля (определены при 30°C) составляют: $\lg K_1 = 7,28$, $\lg K_2 = 6,09$, $\lg K_3 = 4,20$. Сравните устойчивость этих комплексов и аммиаков никеля. С чем связаны такие различия?

Вопрос 1.10.

Опишите проявления и природу эффекта влияния природы внешнесферных катионов на свойства катион-анионных комплексных соединений.

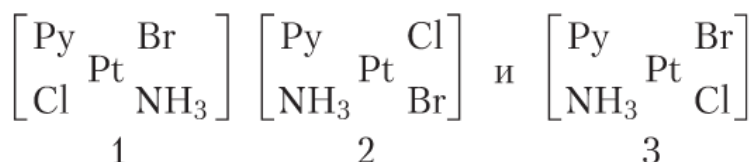
Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 3 балла за вопрос.

Вопрос 2.1.

Проиллюстрируйте принцип наименьшего движения на примере диссоциации квадратного комплекса типа XY_4 . Какой еще тип процесса возможен для аналогичного по симметрии перехода при той же симметрии координаты реакции?

Вопрос 2.2.

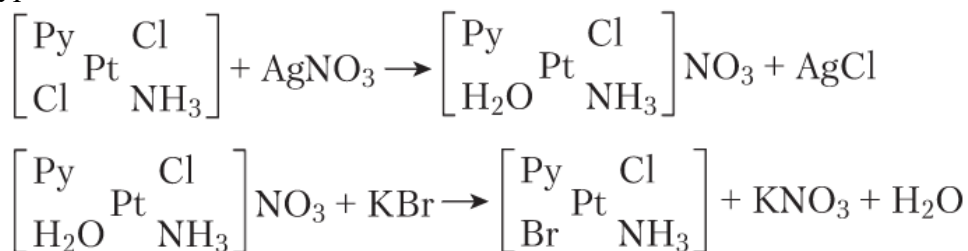
В работе А.Д. Гельман и соавторов (1949 г.) синтезированы три возможные изомеры комплекса $[\text{Pt}(\text{NH}_3(\text{py})\text{ClBr})]$. Их координационное строение отражают следующие формулы:



Изомер 1 получен из реагента:



Путем последовательного действия нитрата серебра и бромида калия согласно уравнениям:



Опишите возможные пути синтеза 2 и 3 изомеров.

Вопрос 2.3.

При осторожном действии щелочи на $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_5\text{X}]\text{X}_3$ образуются комплексы $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4\text{NH}_2\text{X}]\text{X}_2$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$), которые содержат во внутренней сфере амидо-группу (амидо-реакция Л.А. Чугаева, 1915). (а) Напишите уравнение реакции. Как можно объяснить протекание такого процесса? (б) Что происходит при растворении в воде продуктов этой реакции, какова кислотность их раствора? (в) Возможна ли амидо-реакция для гексамина $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_6]\text{X}_4$?

Вопрос 2.4.

Измерены скорости реакции щелочного гидролиза следующих комплексов Co(III) : $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}]^{2+}$ $k_2 = 8.5 \cdot 10^{-1}$ моль $^{-1}$ с $^{-1}$, *транс*- $[\text{Co}(\text{NH}_3)_4\text{Cl}_2]^+$ $k_2 = 1.8 \cdot 10^3$ моль $^{-1}$ с $^{-1}$. Процесс отвечает второму порядку. Как можно объяснить наблюдаемые различия в скоростях? Можно ли по этим данным делать вывод о механизме $\text{S}_\text{N}2$?

Вопрос 2.5.

Реакция перезарядки $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-} \leftrightarrow [\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-} + e^-$ протекает быстро. Какой механизм процесса здесь можно ожидать?

Вопрос 2.6.

Известна реакция окислительного присоединения реагенты $\text{X}-\text{Y}$ к комплексу $[\text{Co}(\text{CN})_6]^{3-}$ с образованием соединений Co(III) . Запишите вероятное уравнение реакции и предположите механизм процесса.

Вопрос 2.7.

Для перевода комплексных ионов $[\text{Pt}(\text{NO}_2)_4]^{2-}$ и $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$ в производные Pt(IV) требуются более жесткие условия, по сравнению с таковыми при окислении $[\text{PtCl}_4]^{2-}$. С чем это можно связать?

Вопрос 2.8.

Шпинели — соединения общего состава AM_2O_4 ($\text{A} = \text{Mg}^{\text{II}}, \text{Zn}^{\text{II}}$ и др.; $\text{M} = \text{Fe}^{\text{III}}, \text{V}^{\text{III}}, \text{Cr}^{\text{III}}, \text{Ti}^{\text{IV}}, \text{Al}^{\text{III}}, \text{Mn}^{\text{III}}$ и др.). Существуют нормальные (A^{II} располагается в тетраэдрическом, а M^{III} — в октаэдрическом окружении) и обращенные шпинели (A^{III} расположены в тетраэдрическом и октаэдрическом окружениях). Определите тип следующих шпинелей: MgFe_2O_4 , FeCr_2O_4 .

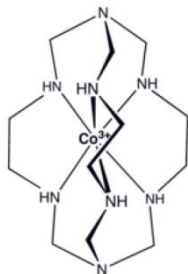
Вопрос 2.9.

Используя уравнение Маркуса-Хаша, определите константу скорости следующей реакции:

$[\text{Co}(\text{sep})]^{3+} + [\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+} = [\text{Co}(\text{sep})]^{2+} + [\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ (Sep - сепулькрат). По какому механизму протекает реакция? Напишите уравнения реакций самообмена.

$E_0 = -0.26 \text{ В}$ ($[\text{Co}(\text{sep})]^{3+/2+}$), -0.40 В ($[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+/2+}$)

$k_1 = 5.1 \text{ М}^{-1}\text{с}^{-1}$ ($[\text{Co}(\text{sep})]^{3+/2+}$), $k_2 = 10^{-5} \text{ М}^{-1}\text{с}^{-1}$ ($[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+/2+}$)



Вопрос 2.10.

Составьте уравнения окислительно-восстановительных реакций с участием комплексов в водном растворе:

а) гексацианоферрат(II) калия + дихлор =

б) хлорид гексаамминкобальта(II) + пероксид водорода =

в) катион дихлоротетрааквахрома(III) + цинк + катион оксония =

г) гексагидроксохромат(III) калия + дибром =

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (3 семестр – зачёт с оценкой).

Билет включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса, по 15 баллов за вопрос.

1. Координационная теория Вернера. Ионно-ковалентные и электростатические модели связи. Концепция эффективного атомного номера. теория Гиллеспи, достоинства и недостатки
2. Метод валентных схем. Теория кристаллического поля. Теория поля лигандов. Особенности, эффекты, рамки применимости, достоинства и недостатки теорий.
3. Типы изомерии комплексных соединений с примерами. Эффекты Яна-Теллера. Формы полиэдров, влияние центрального атома и лигандов. Стереохимически нежесткие комплексные соединения.
4. Комплексные соединения в растворах, константы устойчивости, прямая и обратная задачи теории химических равновесий в растворе, энтальпийный и энтропийный вклады в константу, закономерности в устойчивости координационных соединений.
5. Механизм взаимного влияния. Ряд трансвлияния. Комплексы платины (II). Кислотно-основные свойства комплексных соединений, теории Льюиса и ЖМКО, механизмы нуклеофильного замещения лигандов; лабильность и инертность комплексов.
6. Классификация окислительно-восстановительных реакций, внешнесферный механизм, теория Маркуса-Хаша, перекрёстное соотношение Маркуса, внутрисферный механизм, различие внутри- и внешнесферных механизмов
7. Влияние среды на скорость химических реакций, координационные свойства растворителей, ионизация и диссоциация сольватных комплексов, описание редокс реакций в растворителе: перенос электрона, реакции перезарядки, реакции с изменением координационной сферы, классификация гетерогенных химических реакций.
8. Стабилизация состояний окисления при координации, растворы: решение прямой задачи стабильности, твёрдое состояние: решение обратной задачи стабильности, классификация смешанновалентных систем, окраска и электронная спектроскопия смешанно-валентных соединений, классическое описание, модели «двух-четырёх состояний»
9. Типы химического дизайна, молекулярное моделирование, молекулярный дизайн координационных соединений с органическими лигандами. Методы анализа, установления степени окисления центрального атома и лигандного состава координационных соединений

8.4. Структура и примеры билетов для Зачёта с оценкой (3 семестр).

Зачёт с оценкой по дисциплине «Химия координационных соединений» проводится в 3 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины. Билет для *Зачёта с оценкой* состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для *зачёта с оценкой*:

«Утверждаю» _____ (Должность, наименование кафедры) _____ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедры Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
Химия координационных соединений	
Билет № 1 1. Теория поля лигандов. 2. Стабилизация состояний окисления при координации.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

- К. Эльшенбройх. Металлоорганическая химия. Москва, Издательство “Лаборатория знаний”, 2021.

Б. Дополнительная литература

- Н.А.Костромина, В.Н.Кумок, Н.А.Скорик. Химия координационных соединений, М.: Высшая школа, 1990, С.433
- Кукушкин Ю.А. Химия координационных соединений. – М.: Высшая школа, 1985.
- Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. – Л.: Химия, 1986.
- Коттон Ф. Основы неорганической химии / Ф.Коттон, Дж. Уилкинсон; пер. с англ. – М.: Мир, 1979.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям и семинарам.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <http://www.rsl.ru> - Российская Государственная Библиотека
- <http://www.gpntb.ru> - Государственная публичная научно-техническая библиотека России
- <http://lib.msu.ru> - Научная библиотека Московского государственного университета
- <http://window.edu.ru> - Полнотекстовая библиотека учебных и учебно-методических материалов
- <http://abc-chemistry.org/ru/> - ABC-Chemistry : Бесплатная научная химическая информация
- <http://www.fips.ru/cdfi/fips2009.dll> - Сайт ФИПС. Информация о патентах
- <http://findebookee.com/> - поисковая система по книгам
- <http://elibrary.ru> - Научная электронная библиотека

- <http://lcweb.loc.go> - Библиотека Конгресса США

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

- сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Химия координационных соединений»* проводятся в форме аудиторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие

компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Общие положения и строение координационных соединений	<i>Знает:</i> основные термины и понятия химии координационных соединений; номенклатуру координационных соединений; <i>Владеет:</i> приемами синтеза, основными методами исследования строения и свойств координационных соединений.	Оценка за контрольную работу №1 (3 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (3 семестр)
Раздел 2. Свойства координационных соединений.	<i>Знает:</i> – типы изомерии координационных соединений, виды координационных полиэдров, факторы, влияющие на их строение; – закономерности в устойчивости координационных соединений в растворе и твердом виде <i>Умеет:</i> - планировать синтез простых координационных соединений <i>Владеет:</i> – приемами синтеза, основными методами исследования строения и свойств координационных соединений.	Оценка за контрольную работу №1 (3 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (3 семестр)
Раздел 3. Реакции координационных соединений и влияние среды	<i>Знает:</i> - основные направления, особенности и успехи применения координационных соединений <i>Умеет:</i> - планировать синтез простых координационных соединений - предсказывать физико-химические свойства, строение и реакционную способность координационных соединений на основе их формул; <i>Владеет:</i> – приемами синтеза, основными методами исследования строения и свойств координационных соединений.	Оценка за контрольную работу №2 (3 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (3 семестр)

Раздел 4. Разработка и изучение современных координационных соединений.	<i>Знает:</i> - основные термины и понятия химии координационных соединений; современные теории их описания; - номенклатуру координационных соединений; - основные направления, особенности и успехи применения координационных соединений <i>Умеет:</i> - планировать синтез простых координационных соединений - предсказывать физико-химические свойства, строение и реакционную способность координационных соединений на основе их формул; <i>Владеет:</i> –приемами синтеза, основными методами исследования строения и свойств координационных соединений.	Оценка за зачёт (3 семестр)

12. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

« _____ »

основной образовательной программы

« _____ »

код и наименование направления подготовки (специальности)

« _____ »

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20 ____ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Химия твёрдого тела»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена проф. (перечисление авторов программы: ученая степень, ученое звание, название кафедры, И.О. Фамилия)

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия**, рекомендациями методической комиссии и накопленного опыта преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Химия твёрдого тела»** относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области физики, физической химии.

Цель дисциплины – овладение бакалаврами систематическими знаниями по химии твердого тела, изучение строения, физико-химических свойств и основных принципов получения твердых тел.

Задачи дисциплины

- освоение теоретических представлений о структуре и свойствах твердых тел;
- освоение современных методов исследования материалов;
- изучение методов синтеза твердых веществ;
- получение представления о применении твердых веществ

Дисциплина **«Химия твёрдого тела»** преподается в 6 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональных компетенций и индикаторов их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Тип задач профессиональной деятельности: научно-исследовательский				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-7. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических и гибридных соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-7.1. Знает современные методы, используемые при проектировании направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи ПК-7.2 Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения направленного синтеза органических и гибридных соединений по заданию специалиста более высокой квалификации ПК-7.3 Владеет приёмами обработки, анализа, интерпретации результатов эксперимента по проведению направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданными свойствами	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н) (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономичных и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами</i>

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- причины образования дефектов кристаллической структуры и их классификацию;
- характер влияния равновесных и неравновесных дефектов на структурно-чувствительные свойства твердых тел;
- основные представления о зонной теории и статистике равновесных носителей заряда в твердом теле.
- основные представления об изделиях вакуумной и твердотельной электроники и роли дефектной структуры материалов в этих приборах;
- экспериментальные методы управления концентрацией и природой равновесных дефектов в твердом теле;

Уметь:

- рассчитывать термодинамические характеристики дефектных бинарных неорганических кристаллов;
- самостоятельно определять кристаллическую структуру различных объектов;
- обсуждать результаты проведенного исследования, ориентироваться в современной литературе по кристаллографии и химии твердого тела в различных областях науки и производства, вести дискуссию по вопросам закономерностей и использования современных физико-химических методов анализа твердофазных веществ;

Владеть:

- теорией и навыками практической работы;
- пониманием определяющей роли равновесных дефектов кристаллической структуры при получении материалов с заранее заданными структурно-чувствительными свойствами;

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3,6	128	97,2
Лекции	1,8	64	48,6
Практические занятия (ПЗ)	1,8	64	48,6
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,4	52	37,8
Контактная самостоятельная работа (<i>АттК</i> из УП для зач / зач с оц.)	1,4	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины (<i>или другие виды самостоятельной работы</i>)		52	37,8
Вид контроля:			
Экзамен (если предусмотрен УП)	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1,4	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов			
		Всего	Лек-ции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1. Равновесные дефекты в объеме твердого тела	48	16	16	14
1.1	Типы разупорядочения в кристаллах чистых бинарных соединений	11,5	4	4	3,5
1.2	Электронное разупорядочение в кристаллах	11,5	4	4	3,5
1.3	Примесные атомные дефекты	11,5	4	4	3,5
1.4	Статистика электронов и дырок в твердом теле	11,5	4	4	3,5
2.	Раздел 2. Равновесие кристалла бинарного соединения с газовой фазой одного из компонентов.	34,5	12	12	10,5
2.1	Полное равновесие собственных дефектов	11,5	4	4	3,5
2.2	Обзор структурно-чувствительных свойств кристаллов	11,5	4	4	3,5
2.3	Определение природы доминирующих дефектов	11,5	4	4	3,5
3.	Раздел 3. Равновесие дефектов в кристаллах соединений	44	16	16	12
3.1	Равновесие дефектов в кристаллах соединений	22	8	8	6
3.2	Управление структурно-чувствительными свойствами кристаллов	22	8	8	6
4.	Раздел 4. Основные методы исследования структурно-чувствительных свойств кристаллов	55,5	20	20	15,5
4.1	Оптические методы исследования реальной дефектной структуры твердых тел	22	8	8	6
4.2	Исследование электропроводности кристаллов	11,5	4	4	3,5
4.3	Применение методов рентгенографии, электронной спектроскопии и микроскопии	22	8	8	6
	ИТОГО	180	64	64	52
	Экзамен	36			
	ИТОГО	216			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1 Равновесные дефекты в объеме твердого тела

1.1. Типы разупорядочения в кристаллах чистых бинарных соединений. Основные типы собственного атомного разупорядочения (по Шоттки, по Френкелю, антиструктурное).

Энергия атомного разупорядочения и методы ее определения. Квазихимический метод; квазихимические реакции с участием дефектов.

1.2. Электронное разупорядочение в кристаллах; свободные электроны и дырки. Нейтральные и заряженные атомные дефекты. Элементы зонной теории твердого тела. Сравнение структурно-чувствительных свойств металлов, полупроводников и диэлектриков с точки зрения зонной теории.

1.3. Примесные атомные дефекты. Легирование кристаллов. Современные физические и химические методы легирования; определение концентрационных профилей легирования.

1.4. Донорно-акцепторные свойства собственных и примесных атомных дефектов. Ассоциация атомных дефектов ее влияние на структурно-чувствительные свойства твердых тел.

1.5. Статистика электронов и дырок в твердом теле. Функция распределения Ферми-Дирака. Вырожденные и невырожденные полупроводники. Химический потенциал электрона. Уровень Ферми. Полупроводники n- и p- типа. Скомпенсированные полупроводники. Границы применения зонной теории твердого тела.

Раздел 2. Равновесие кристалла бинарного соединения с газовой фазой одного из компонентов.

2.1. Полное равновесие собственных дефектов в кристаллах чистых бинарных соединений. Метод Броуэра. Частичное равновесие и отклонение от стехиометрии. Закалка. Управление составом и свойствами кристаллов бинарных соединений на примере систем "оксид - кислород", "сульфид сера". Односторонние и двухсторонние фазы. Факторы, определяющие ширину области гомогенности. Термодинамический p-p-переход. Электронные и ионные полупроводники.

2.2. Обзор структурно-чувствительных свойств кристаллов оксидов и халькогенидов переходных металлов, полупроводниковых соединений $A^N B^{8-N}$.

2.3. Определение природы доминирующих дефектов.

Раздел 3. Равновесие дефектов в кристаллах соединений

3.1. Равновесие дефектов в кристаллах соединений, содержащих примесные атомы. Гетеровалентный изоморфизм. Механизмы внедрения примесей: механизм контролируемых атомных дефектов и механизм контролируемых электронных дефектов. (контролируемой валентности). Донорно-акцепторные свойства примесей. Влияние состава газовой фазы на растворимость и механизм внедрения примесей. Взаимное влияние двух примесей на растворимость. Принцип компенсации заряда.

3.2. Управление структурно-чувствительными свойствами кристаллов контролируемым введением примесей: люминесценция, электропроводность, магнитные свойства и др.

Раздел 4. Основные методы исследования структурно-чувствительных свойств кристаллов

4.1. Оптические методы исследования реальной дефектной структуры твердых тел. Характеристики неравновесного состояния электронов и дырок в полупроводниках. Генерация, рекомбинация и среднее время жизни неравновесных носителей. Рекомбинационная люминесценция. Фото- и катодолюминесценция. Люминесценция как метод исследования топкой дефектной структуры твердых тел. Оптические спектры поглощения и отражения кристаллов. Спектроскопия диффузного отражения, ее приложения для определения зонной структуры твердого тела, характера взаимодействия дефектов.

4.2. Исследование электропроводности кристаллов в зависимости от температуры, состава и давления газовой фазы - один из основных методов изучения равновесий атомных и электронных дефектов в твердом теле.

4.3. Применение методов рентгенографии, электронной спектроскопии и микроскопии, пикнометрического анализа для определения дефектной структуры твердого тела.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:				
1	– причины образования дефектов кристаллической структуры и их классификацию;	+			
2	– характер влияния равновесных и неравновесных дефектов на структурно-чувствительные свойства твердых тел;	+			
3	– основные представления о зонной теории и статистике равновесных носителей заряда в твердом теле;		+		
4	– основные представления об изделиях вакуумной и твердотельной электроники и роли дефектной структуры материалов в этих приборах;			+	
5	– экспериментальные методы управления концентрацией и природой равновесных дефектов в твердом теле;				+
	Уметь:				
6	– рассчитывать термодинамические характеристики дефектных бинарных неорганических кристаллов;	+			
7	– самостоятельно определять кристаллическую структуру различных объектов;		+	+	
8	– обсуждать результаты проведенного исследования, ориентироваться в современной литературе по кристаллографии и химии твердого тела в различных областях науки и производства, вести дискуссию по вопросам закономерностей и использования современных физико-химических методов анализа твердофазных веществ;				+
	Владеть:				
9	– теорией и навыками практической работы;	+	+	+	+
10	– пониманием определяющей роли равновесных дефектов кристаллической структуры при получении материалов с заранее заданными структурно-чувствительными свойствами;	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>					
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК			

4	ПК-7. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических и гибридных соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-7.1. Способен проектировать направленный синтез органических и гибридных соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Типы разупорядочения в кристаллах чистых бинарных соединений	4
2	1	Электронное разупорядочение в кристаллах	4
3	1	Примесные атомные дефекты	4
4	1	Статистика электронов и дырок в твердом теле	4
5	2	Полное равновесие собственных дефектов	4
6	2	Обзор структурно-чувствительных свойств кристаллов	4
7	2	Определение природы доминирующих дефектов	4
8	3	Равновесие дефектов в кристаллах соединений	8
9	3	Управление структурно-чувствительными свойствами кристаллов	8
10	4	Оптические методы исследования реальной дефектной структуры твердых тел	8
11	4	Исследование электропроводности кристаллов	4
12	4	Применение методов рентгенографии, электронной спектроскопии и микроскопии	8

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине «Химия твёрдого тела» не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *зачёту* (5 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов), и итогового контроля в форме *экзамена* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы составляет по 20 баллов за каждую.

Раздел 1,2. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1. Какие факторы влияют на величину внутренней энергии кристалла:
а) тип кристаллической решетки б) заряд ионов в) межионные расстояния г) все перечисленные факторы
2. Для каких ионов справедливо понятие «термохимический радиус»:
а) катионов б) анионов в) однозарядных катионов г) сложных анионов д) сложных анионов сферической формы
3. Что называется внутренней энергией кристаллической решетки:
а) теплота образования 1 моль сложного вещества из простых веществ б) теплота образования 1 моль сложного вещества из ионов в) теплота образования 1 моль сложного вещества из ионов, находящихся в газообразном состоянии
4. Какие факторы влияют на структуру кристалла:
а) стехиометрия соединения б) тип химической связи г) размеры частиц г) все перечисленные факторы д) ни один из перечисленных факторов не влияет
5. Медь пластичнее вольфрама. Этот факт объясняется тем, что а) у этих металлов различное электронное строение б) существует различие в краевых дислокациях в) у них различные кристаллические решетки
6. Элементарная ячейка кристаллической структуры представляет собой:
а) основной структурный элемент, из которого построен весь кристалл б) наиболее часто повторяющийся из нескольких элемент структуры кристалла в) элемент краевой дислокации
7. Координационным числом называется: а) число повторяющихся элементов в структуре кристалла б) число положительно заряженных ионов в элементарной ячейке в) число ближайших соседних атомов в упаковке
8. Плотнейшая упаковка возникает когда:
а) химическая связь обладает ненаправленностью б) химическая связь обладает направленностью в) химическая связь гибридизируется по механизму sp^d
9. На кристаллическую структуру керамики влияют:
а) величина электрических зарядов катионов и анионов структуры б) относительный размер катионов и анионов структуры в) оба этих фактора одновременно г) ни один из этих факторов
10. Флюорит (Ca^{+2}) имеет структуру:
а) гранецентрированную структуру, в которой ионы F^- находятся в вершинах и центрах граней, в октаэдрических пустотах которой расположены ионы Ca^{+2} б) атом Ca находится внутри куба, образованного восемью атомами фтора в) ионы Ca^{+2} расположены в восьми углах куба, а ионы F^- расположены по центрам шести граней.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 балла за вопрос.

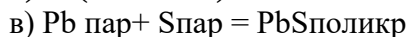
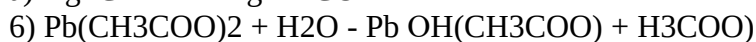
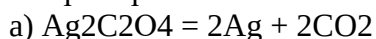
1. Правило Юм-Розери определяет:
а) координационное число неметалла в структуре б) зависимость электропроводности твердого тела от температуры в) такого правила не существует
2. В терминах теории плотнейших упаковок структура алмаза описывается как:
а) ГЦК - гранецентрированная кубическая упаковка б) слоистая структура в) линейная структура
3. Полиморфизм - это:
а) когда вещество существует в нескольких кристаллических формах б) химический элемент существует в виде нескольких простых соединений в) химический элемент при образовании соединений с кислородом проявляет переменную валентность
4. Для кристаллов характерны:
а) анизотропность свойств и резко выраженная температура перехода в жидкое состояние б) изотропность свойств и резко выраженная температура перехода в жидкое состояние в) изотропность свойств и некоторый интервал температур перехода в жидкое состояние
5. Аморфные вещества: а) изотропны б) анизотропны
6. К аморфным веществам относят:
а) дисперсные системы, металлы, газы б) дисперсные системы, полимеры, стеклообразные вещества в) полимеры, ситаллы, металлы
7. К аморфно-кристаллическим веществам относят:
а) графит б) бронза в) фарфор г) цинк
8. В классификации дефектов по Ван-Бюрену точечные дефекты это: а) нульмерные б) одномерные в) двумерные г) трехмерные
9. Дифракция рентгеновских лучей.
10. Ковалентный радиус.

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 10 вопроса, по 2 балла за вопрос.

1. Твердофазные процессы могут быть:
а) только гомогенными б) только гетерогенными в) возможны как гомогенные, так и гетерогенные процессы
2. Продукт твердофазного превращения может отличаться от исходной фазы:
а) составом (при сохранении координации атомов в решетке) б) структурой и фазовым составом в) кристаллической структурой (координацией атомов в решетке) г) всеми перечисленными признаками
3. По механизму протекающих процессов твердофазные превращения подразделяются на:
а) диффузионные и бездиффузионные б) когерентные и некогерентные в) ламинарные и экстракционные
4. Влияет ли состояние кристаллической решетки на реакционную способность твердых тел?
а) влияет б) не влияет в) влияет лишь при температуре выше 1000K
5. Активное состояние твердых тел характеризуется:
а) наличием неравновесных дефектов б) отсутствием дефектов в) наличием только нульмерных дефектов
6. Влияет ли диспергирование на скорость твердофазных процессов?
а) влияет б) не влияет в) влияет только совместно с минерализацией
7. На скорость твердофазных реакций влияет:
а) температура б) давление в) состав газовой среды г) все перечисленные факторы
8. Фазовым переходом второго рода не является:

а) переход сплава Cu-Zn из упорядоченного в разупорядоченное состояние твердого раствора б) переход антиферромагнетика (MnO) в парамагнетик в) переход титаната бария из тетрагональной модификации в кубическую (несегнетоэлектрик) г) переход холестерилхлорида из жидкокристаллического состояния в обычную жидкость

9. Примером топохимической реакции является:



10. Кинетическое уравнение $x = Kt^{1/2}$ (где x - количество образовавшегося продукта, t - время, K - константа скорости реакции) описывает кинетику реакции $A + B = AB$.

Какое из утверждений неверное?

а) показатель степени указывает, что лимитирующей стадией реакции является диффузия

б) константа K зависит от температуры процесса в) лимитирующей стадией является зародышеобразование г) константа скорости зависит от степени дисперсности реагентов.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (6 семестр – экзамен).

Максимальное количество баллов за **экзамен** – 40 баллов. Экзаменационный билет содержит 4 вопроса по 10 баллов каждый.

1. Предмет и задачи химии твердого тела.
2. Классификация дефектов твердого тела. Неравновесные дефекты.
3. Теоремы о свойствах инверсионных осей.
4. Термодинамически равновесные дефекты твердого тела. Атомные дефекты.
5. Теоремы о взаимодействии закрытых элементов симметрии.
6. Электронные дефекты твердого тела: электроны, дырки, экситоны.
7. Точечные группы симметрии и их распределение по сингониям.
8. Основные типы атомного разупорядочения в кристаллах MX
Энергия кристаллической решетки (ЭКР). ЭКР кристаллов A^2B^6 , A^3B^5 .
9. Электронное разупорядочение в кристаллах MX. Статистика Ферми Дирака.
10. Классификация фазовых Переходов в твердом теле. Фазовые переходы типа " порядок - беспорядок "
11. Основные представления о зонной теории твердого тела.
12. Изоморфные замещения атомов в кристаллах. Структурно-чувствительные свойства разбавленных твердых растворов замещения.
13. Химический потенциал электрона. Уровень Ферми.
14. Ионные полупроводники. Твердые электролиты.
15. Простые формы кристаллов и их распределение по сингониям.
16. 14 решеток Браве и их распределение сингониям.
17. Примесные дефекты твердого тела. Донорно - акцепторные свойства примесей.
18. Полное равновесие собственных дефектов в чистых кристаллах MX. Метод Броуэра.
19. Управление составом и свойствами кристаллов MX на примере систем "оксид - кислород", "сульфид - сера".
20. Односторонние и двухсторонние фазы. Факторы, определяющие ширину области гомогенности.
21. Термодинамический p-n- переход. Электронные и ионные полупроводники.

22. Гетеровалентный изоморфизм. Основные механизмы внедрения примесей: контролируемых атомных дефектов и контролируемых электронных дефектов.
23. Влияние состава газовой фазы на растворимости и механизм внедрения примесей. Принцип компенсации заряда.
24. Дефектной структуры твердого тела: рекомбинационная, фото катодолюминесценция.
25. Исследование Т-Р-х электропроводности кристаллов один из основных методов изучения равновесных атомных и электронных дефектов в твердом теле.
26. Примесные атомные дефекты, Современные физико – химические методы легирования кристаллов.
27. Сравнительный обзор структурно - чувствительных свойств бинарных кристаллов $A^N B^{8-N}$ электрических, оптических, магнитных и др.
28. Ассоциация атомных дефектов и ее влияние на структурно чувствительные свойства твердых тел.
29. Энергия атомного разупорядочения. Квазихимические реакции с участием равновесных атомных и электронных дефектов.
30. Варизонные кристаллические структуры. Особенности равновесия атомных и электронных дефектов в наноразмерных твердых телах,
31. Место химии твердого тела среди других наук о твердом состоянии вещества - кристаллохимии, физики твердого тела. Реальное твердое тело.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (6 семестр).

Экзамен по дисциплине «*Химия твёрдого тела*» проводится в 6 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины. Билет для *экзамена* состоит из 4 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для *вид контроля из УП*:

«Утверждаю» _____ (Должность, наименование кафедры) _____ (Подпись) _____ (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
	<i>Химия твёрдого тела</i>
Билет № _ 1. Простые формы кристаллов и их распределение по сингониям. 2. 14 решеток Браве и их распределение сингониям. 3. Примесные дефекты твердого тела. Донорно - акцепторные свойства примесей. 4. Сравнительный обзор структурно - чувствительных свойств бинарных кристаллов $A^N B^{8-N}$ электрических, оптических, магнитных и др.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Современная химия: учебное пособие Сватовская Л.Б. - М.: УМЦЖДТ, 2013. - 252 с.
2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие/ М.: «Лаборатория знаний», 2014. - 522 с.

Б. Дополнительная литература

1. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. /Гусев А.И. - 2-е изд., испр. - М. ФИЗМАТЛИТ, 2009. - 416 с.
2. Кристаллохимия. Краткий курс: учебник/Урусов В.С., Ерёмин Н.И. - М. Издательство Московского государственного университета, 2010. - 256 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Научно-технические журналы:

Научно-технические журналы:

- Реферативный журнал «Физика» (РЖФ) ISSN 0869-5873;
- «Физика твердого тела» ISSN 0367-3294;
- Политематические базы данных (БД):

США: CAPLUS; COMPENDEX;

- Великобритания: INSPEC;
- Франция: PASCAL.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

- сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*Химия твёрдого тела*» проводятся в форме аудиторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проектор; экран; аудитория со стационарным комплексом отображения информации с электронного носителя; сканер; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

13.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

14. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – причины образования дефектов кристаллической структуры и их классификацию; – характер влияния равновесных и неравновесных дефектов на структурно-чувствительные свойства твердых тел; <i>Умеет:</i> – рассчитывать термодинамические характеристики дефектных бинарных неорганических кристаллов; <i>Владеет:</i> – теорией и навыками практической работы; – пониманием определяющей роли равновесных дефектов кристаллической структуры при получении материалов с заранее заданными структурно-чувствительными свойствами;	Оценка за контрольную работу №1 (6 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (6 семестр)
Раздел 2. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – основные представления о зонной теории и статистике равновесных носителей заряда в твердом теле. <i>Умеет:</i> – самостоятельно определять кристаллическую структуру различных объектов; <i>Владеет:</i> – теорией и навыками практической работы; – пониманием определяющей роли равновесных дефектов кристаллической структуры при получении материалов с заранее заданными структурно-чувствительными свойствами;	Оценка за контрольную работу №1 (6 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (6 семестр)

Раздел 3. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – основные представления об изделиях вакуумной и твердотельной электроники и роли дефектной структуры материалов в этих приборах; <i>Умеет:</i> – самостоятельно определять кристаллическую структуру различных объектов; <i>Владеет:</i> – теорией и навыками практической работы; – пониманием определяющей роли равновесных дефектов кристаллической структуры при получении материалов с заранее заданными структурно-чувствительными свойствами;	Оценка за контрольную работу №2 (6 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (6 семестр)
Раздел 4. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – экспериментальные методы управления концентрацией и природой равновесных дефектов в твердом теле; <i>Умеет:</i> – обсуждать результаты проведенного исследования, ориентироваться в современной литературе по кристаллографии и химии твердого тела в различных областях науки и производства, вести дискуссию по вопросам закономерностей и использования современных физико-химических методов анализа твердофазных веществ; <i>Владеет:</i> – теорией и навыками практической работы; – пониманием определяющей роли равновесных дефектов кристаллической структуры при получении материалов с заранее заданными структурно-чувствительными свойствами;	Оценка за контрольную работу №3 (6 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (6 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программ бакалавриата, программ специалитета, программ магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

« _____ »

основной образовательной программы

« _____ »

код и наименование направления подготовки (специальности)

« _____ »

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.
		протокол заседания Ученого совета № _____ от « ____ » _____ 20__ г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Химия элементов»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры Сколтеха к.х.н. Рукк Н. С.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра. Дисциплина «**Химия элементов**» относится к Обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области Теоретической неорганической химии.

Цель дисциплины – изучение электронного строения элементов Периодической системы химических элементов им. Д.И. Менделеева, их химических и физических свойств, способов получения и областей применения.

Задачи дисциплины

- сформировать представления об основных химических системах и процессах;
- дать определенный комплекс знаний о реакционной способности веществ;
- дать основу знаний о методах химической идентификации веществ.

Дисциплина «**Химия элементов**» преподается во 2 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- химические свойства элементов различных групп периодической системы и их важнейших соединений;
- методы теоретического и экспериментального исследования;
- методы химической идентификации веществ;

Уметь:

- использовать основные элементарные методы химического исследования веществ и соединений;
- использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач;

Владеть:

- инструментарием для решения химических задач;
- теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов;

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	8	216	288
Контактная работа – аудиторные занятия:	5,4	143	192
Лекции	1,8	47,6	64
Практические занятия (ПЗ)	1,8	47,6	64
Лабораторные работы (ЛР)	1,8	47,6	64
Самостоятельная работа	1,6	46	60
Контактная самостоятельная работа	1,6	-	-
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		46	60
Вид контроля:			
Экзамен	1	27	36
Контактная работа – промежуточная аттестация	1	0,3	0,4
Подготовка к экзамену.		26,7	35,6
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Лаб. работы	Сам. работа
1	Химия s-элементов	41	8	8	12	13
2	Химия p-элементов	88	24	24	32	20
3	Химия d-элементов	88	24	24	20	20
4	Химия f-элементов	23	8	8	-	7
	ИТОГО	252	64	64	64	60
	Экзамен	36				
	ИТОГО	288				

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Химия s-элементов и их соединений

1.1 Общая характеристика щелочных элементов. Нахождение в природе, способы получения из природного сырья. Соединения щелочных металлов: оксиды, пероксиды, надпероксиды, озониды, гидриды, галогениды, нитриды, сульфиды, способы получения и свойства. Гидроксиды щелочных металлов, получение и химические свойства.

Соли щелочных металлов, способы получения и свойства. Изменение термической устойчивости карбонатов, нитратов и сульфатов в ряду литий-цезий.

Получение соды (аммиачный способ Сольве и сульфатный способ Леблана) и поташа.

Малорастворимые соли щелочных металлов. Особенности химии лития и его соединений.

1.2 Общая характеристика элементов II-A подгруппы. Нахождение в природе, способы получения из природного сырья.

Особенности химии бериллия. Физические и химические свойства бериллия, магния, и их соединений. Амфотерность соединений бериллия.

Щелочноземельные металлы (кальций, стронций, барий), способы получения и свойства.

Оксиды, гидроксиды, карбонаты, сульфаты, фосфаты нитраты элементов II-A подгруппы, получение и химические свойства. Гидролиз растворимых солей бериллия и магния. Диагональное сходство соединений бериллия и алюминия, магния и лития.

Жесткость воды и способы её устранения.

Раздел 2. Химия p-элементов и их соединений

2.1 Общая характеристика элементов III-A подгруппы. Сравнительная характеристика физических и химических свойств простых веществ.

Бор. Соединения бора в природе. Способы получения бора. Физические и химические свойства бора.

Соединения бора с металлами и неметаллами. Бориды, борогидриды металлов, бороводороды (гомологические ряды гидридов BnH_{n+4} и BnH_{n+6}): способы получения, химическая связь в бороводородах, химические свойства. Нитрид и карбид бора.

Галогениды бора, их свойства. Тетрафтороборная кислота и её соли.

Оксид бора (III), борные кислоты, получение и свойства. Получение и строение буры, её гидролиз. Переработка буры в борную кислоту. Эфиры борной кислоты. Бораты, их свойства, строение борат-ионов. «Перлы» буры.

Боразол, получение и свойства. Применение бора и его соединений.

Алюминий. Природные соединения и получение алюминия. Физические и химические свойства алюминия. Сплавы алюминия. Алюмотермическое получение металлов.

Оксид, гидроксид алюминия, их химические свойства. Свойства алюминатов, полученных методом твердофазного синтеза и в водных растворах.

Гидролиз солей алюминия и алюминатов. Комплексные соединения алюминия и двойные соли. Гидрид алюминия и гидридоалюминаты щелочных металлов, их применение в качестве восстановителей. Получение, строение и свойства безводных галогенидов алюминия. Соединения алюминия в состоянии степени окисления (I).

Галлий, индий, таллий. Извлечение галлия, индия и таллия из отходов производства алюминия и цветных металлов.

Изменение устойчивости соединений галлия, индия и таллия в состоянии степени окисления (III) и (I). Способы получения одно- и трёхвалентных соединений галлия, индия и таллия.

Амфотерность оксида и гидроксида галлия (III). Оксиды и гидроксиды индия и таллия, их свойства. Соли галлия, индия и таллия. Применение некоторых соединений в полупроводниковой технике.

2.2.Общая характеристика элементов IV-A подгруппы. Углерод. Аллотропные модификации углерода – графит, алмаз, карбин, фуллерены, графен. Получение искусственных алмазов. Углеродные нанотрубки.

Химические свойства углерода. Важнейшие карбиды металлов, их классификация.

Соединения углерода с галогенами, способы получения, свойства и практическое применение.

Соединения углерода с другими неметаллами – сероуглерод, карборунд, карбид бора, дициан.

Циановодород и изоциановодород, циановодородная (синильная) кислота и цианиды, способы получения и химические свойства. Цианамид и цианамиды металлов. Реакции окисления циановодорода и цианидов.

Цианаты, способы получения и свойства. Равновесия в растворах циановой кислоты (изоциановая, фульминовая), их соли.

Тиоцианат водорода и тиоциановая кислота и её соли – тиоцианаты и изотиоцианаты, их свойства. Тиоциан.

Комплексные соединения, содержащие в качестве лигандов ионы CN^- и SCN^- .

Карбамид, способы получения, свойства и применение.

Кремний. Способы получения и очистки. Силициды, их классификация. Карбид и нитрид кремния. Соединения кремния с галогенами. Гексафторокремниевая кислота и её соли.

Оксид кремния, кремниевые кислоты и их соли. Силикагель, получение, применение.

Цеолиты. Силикаты, их гидролиз.

Искусственные силикаты: стёкла, ситаллы, цементы; принципы промышленного получения стекла и цемента.

Современные представления о строении силикатов. Основные типы структур силикатов: цепные, циклические, слоистые, трёхмерные.

Германий, олово, свинец. Основные минералы и способы получения. Методы очистки германия. Германий как вещество с полупроводниковыми свойствами.

Изменение окислительно-восстановительной устойчивости соединений элементов в степени окисления (IV) и (II) ряду германий-свинец.

Химические свойства германия, олова и свинца, их взаимодействие с кислотами и щелочами.

Важнейшие соединения германия, олова и свинца (IV) и (II): оксиды, гидроксиды, галогениды, гидриды, способы получения и свойства. Сульфиды, способы получения и свойства. Соли тиокислот.

Сурик. Сравнение окислительно-восстановительных, кислотно-основных и комплексобразующих свойств соединений свинца (II) и (IV). Свинцовые аккумуляторы.

Общая характеристика солей, их растворимость гидролизуемость, термическая устойчивость.

2.3.Общая характеристика элементов V-A подгруппы. Азот. Распространенность и нахождение азота в природе. Круговорот азота в природе. Промышленные и лабораторные способы получения азота.

Электронное строение молекулы азота. Физические и химические свойства азота. Современные способы связывания атмосферного азота. Комплексные соединения с молекулярным азотом.

Аммиак. Строение молекулы, физические свойства. Получение аммиака в лаборатории. Физико-химические основы промышленного синтеза аммиака.

Жидкий аммиак как растворитель. Растворы щелочных и щёлочно-земельных металлов в жидком аммиаке.

Амиды, имиды, нитриды, их свойства.

Равновесие в системе аммиак-вода.

Химические свойства аммиака – реакции замещения, присоединения и окисления. Галогениды азота, способы получения и свойства.

Строение катиона аммония. Соли аммония, их получение и свойства. Термическая устойчивость солей аммония. Гидролиз солей аммония.

Гидразин и гидроксилламин, строение молекул, способы получения и химические свойства. Азидоводород, строение азид-иона, получение, свойства азидоводородной кислоты и азидов металлов.

Оксиды азота (I, II, III, IV, V), способы получения, химическая связь в молекулах, свойства. Закономерности в изменении свойств оксидов азота (дипольные моменты, межмолекулярные взаимодействия, термическая устойчивость кислотные свойства, реакции диспропорционирования).

Азотноватистая кислота и её соли – гипонитриты.

Азотистая кислота, её таутомерия и нитриты, способы получения и свойства. Азотная кислота и нитраты, способы получения и свойства.

Термическая устойчивость нитратов.

Сопоставление химических свойств азотистой и азотной кислот и их солей.

Царская водка и её окислительные свойства.

Применение азота и его соединений. Азотные удобрения.

Фосфор, основные минералы, получение фосфора в промышленности. Аллотропные модификации фосфора, их свойства.

Водородные соединения фосфора – фосфин и дифосфин, способы получения и свойства. Соли фосфония, их термическая и гидролитическая устойчивость.

Кислородные соединения фосфора – способы получения, структура, химические свойства.

Оксокислоты фосфора и их соли: $H_{n+2}P_nO_{3n+1}$ (ортофосфорная, дифосфорная, трифосфорная, полиметафосфорные);

$H_nP_nO_{3n}$ (цикло-триметафосфорная, цикло-тетраметафосфорная, полиметафосфорные);

изомерные фосфорноватая и фосфористофорная $H_4P_2O_6$;

пероксомонофосфорная и пероксодифосфорная, способы получения и свойства.

Оксокислоты фосфора, содержащие связи P–N: фосфоновая, фосфиновая, дифосфоновая и их соли, способы получения и свойства.

Соединения фосфора с галогенами – тригалогениды и пентагалогениды, тетрагалогениды дифосфора, оксогалогениды фосфора, получение и свойства.

Соединения фосфора с серой и азотом.

Аналитические методы идентификации фосфорных кислот и их солей.

Фосфорные удобрения и моющие средства на основе фосфатов.,

Мышьяк, сурьма, висмут. Распространенность и нахождение в природе, способы получения. Аллотропные модификации.

Химические свойства мышьяка, сурьмы и висмута. Соединения с металлами и водородные соединения.

Оксиды, гидроксиды, кислоты, соли мышьяка, сурьмы и висмута в состояниях степеней окисления (III) и (V), способы получения. Сопоставление кислотно-основных и

окислительно-восстановительных свойств. Соединения висмута (V) – висмутаты, их получение и свойства как сильных окислителей.

Тригалогениды и пентагалогениды мышьяка, сурьмы и висмута, получение и свойства. Низшие галогениды. Галогенидные комплексы и оксогалогениды.

Сульфиды мышьяка, сурьмы и висмута, получение и свойства. Тиосоли.

2.4. Общая характеристика элементов VI-A. Кислород. Физические свойства, строение молекулы, парамагнетизм кислорода. Лабораторные способы и промышленное получение кислорода.

Химические свойства кислорода. Кислород как окислитель. Окисление (горение) простых и сложных веществ в атмосфере кислорода.

Важнейшие кислородные соединения: оксиды элементов, гидроксиды, оксокислоты и их соли, пероксиды, надпероксиды; их свойства.

Строение O^{2+} , O^{2-} , O_2^{2-} , O_2^- в рамках метода МО. Пероксид водорода, строение молекулы, способы получения и свойства.

Озон как аллотропная модификация кислорода. Получение, электронное строение молекулы, химические свойства. Применение озона для озонирования воды и воздуха, а также в качестве окислителя в синтезах.

Роль кислорода как элемента в биологических и минеральных процессах на Земле.

Сера, селен, теллур, полоний.

Общая характеристика элементов. Распространенность и формы нахождения в природе. Аллотропные и полиморфные модификации. Способы получения.

Сера и её соединения. Химические свойства серы.

Бинарные соединения серы: сульфаны и сульфиды, их свойства и способы получения.

Растворимость сульфидов в воде, в водных растворах кислот и щелочей. Реакции осаждения сульфидов.

Кислородные соединения серы. Некоторые низшие оксиды серы (S_nO , S_2O).

Оксид серы (IV). Физические свойства, строение молекулы, способы получения и химические свойства.

Равновесия в водных растворах ($SO_{2(g)} + H_2O_{(ж)}$).

Оксид серы (VI). Физические свойства, строение молекулы, способы получения и химические свойства.

Оксокислоты серы и их соли:

дитионистая и дитиониты;

дисернистая и дисульфиты;

сернистая, сульфиты и гидросульфиты;

политионовые $H_2S_{n+2}O_6$ и политионаты;

серная, сульфаты и гидросульфаты;

дисерная и дисульфаты;

тиосерная и тиосульфаты;

пероксомоносерная (кислота Каро) и пероксомоносульфаты;

пероксодисерная и пероксодисульфаты.

Способы получения и свойства перечисленных выше кислот и их солей.

Галогениды серы, способы получения и свойства. Оксогалогенидные кислоты серы.

Некоторые бинарные соединения серы.

Селен, теллур.

Химические свойства селена и теллура. Селениды и теллуриды. Водородные соединения селена и теллура.

Оксиды селена и теллура (IV) и (VI), способы получения и свойства.

Оксокислоты селена и теллура, их соли, способы получения и свойства.

Соединения селена и теллура с галогенами, способы получения и свойства.

Некоторые бинарные соединения селена и теллура с азотом и фосфором.

Полоний; отсутствие стабильных изотопов. Способы концентрирования и отделения его от других элементов. Способы получения полония.

Химические свойства полония; полониды, галогениды.

Водород. Положение водорода в периодической системе элементов. Распространенность в природе. Физические и химические свойства водорода. Лабораторные и промышленные способы получения. Гидриды элементов, их классификация и свойства.

2.5. Общая характеристика элементов VII-A подгруппы. Галогены. Лабораторные и промышленные способы получения. Сравнительная характеристика физических и химических свойств галогенов.

Особенности химии фтора. Фториды металлов и кислорода, их свойства.

Галогеноводороды, способы получения, физические и химические свойства. Сравнительная характеристика энергии связи водород-галоген, термической устойчивости и восстановительных свойств галогеноводородов. Растворы галогеноводородов в воде, изменение силы галогеноводородных кислот в ряду HF-HI. Плавиновая кислота, процесс ассоциации молекул во фтороводороде и плавиновой кислоте. Дифторогидрогенаты некоторых металлов.

Кислородные соединения галогенов, химическая связь в молекулах, способы получения, физические и химические свойства.

Процессы взаимодействия хлора, брома и йода с водой и водными растворами щелочей (процессы сольватации и диспропорционирования, термические и кинетические характеристики взаимодействия галогенов с водой).

Кислородсодержащие кислоты хлора, брома, йода, и их соли; состав, способы получения и свойства. Сравнительная характеристика устойчивости этих соединений и их окислительных свойств в водных растворах. Свойства солей кислородсодержащих кислот как окислителей в твёрдой фазе.

Межгалогидные соединения, способы получения, свойства.

Области применения галогенов и их соединений. Благородные газы. Нахождение в природе, промышленные способы получения.

Клатратные соединения благородных газов.

Соединения ксенона со фтором: их состав, способы получения и химические свойства. Фториды криптона, получение и свойства.

Кислородные соединения ксенона, криптона; кислородсодержащие кислоты и их соли, получение и свойства.

Области применения благородных газов.

Раздел 3. Химия d-элементов и их соединений

Сравнительная характеристика закономерностей изменения химических свойств d-элементов и их соединений в группах и периодах периодической системы.

3.1 Скандий, иттрий, лантан. Нахождение в природе. Промышленные способы получения металлов и их химические свойства. Оксиды, гидроксиды, соли (двойные и комплексные), их свойства. Применение скандия, иттрия лантана и их соединений.

3.2 Титан, цирконий, гафний. Природные источники, способы получения и очистки металлов. Физические и химические свойства. Соединения элементов IV-Б группы со степенью окисления (IV): оксиды и гидроксиды, галогениды, комплексные соединения, получение и свойства.

Состояние четырёхвалентных титана, циркония и гафния в водных растворах, полимеризация за счёт гидроксо(оловых) и оксо(оксоловых) мостиков.

Бинарные соединения титана, циркония и гафния: карбиды, нитриды, сульфиды и материалы на их основе.

Пероксосоединения элементов (IV), получение и свойства.

Сопоставление окислительно-восстановительной устойчивости соединений со степенями окисления (IV), (III), (II) в ряду титан – гафний. Способы получения и свойства соединений в низших состояниях окисления.

3.3. Ванадий, ниобий, тантал. Нахождение в природе, основные минералы, способы получения. Соединения элементов со степенью окисления (V), получение и свойства. Влияние pH среды на состояние ионов в водных растворах. Изополи- и гетерополисоединения ванадия. Ванадаты, ниобаты, танталаты, получение и свойства. Изменение устойчивости соединений с высшими и низшими степенями окисления в ряду ванадий – тантал. Получение соединений с низшими состояниями окисления (IV), (III), (II), их свойства. Сопоставление окислительно-восстановительных и кислотно-основных свойств соединений ванадия со степенями окисления (V), (IV), (III), (II).

3.4. Хром, молибден, вольфрам. Общая характеристика элементов, их валентные состояния. Основные минералы. Переработка хромистого железняка в дихромат и феррохром. Особенности получения металлических молибдена и вольфрама.

Физические и химические свойства металлов. Соединения хрома в состоянии степени окисления (II): оксид, гидроксид, соли; получение и свойства.

Соединения хрома в состоянии окисления (III): оксид, гидроксид, соли и хромиты. Гидратная изомерия солей хрома (III); комплексные соединения и двойные соли.

Оксид хрома (VI) получение и свойства. Кислотно-основное равновесие в водных растворах хроматов и дихроматов. Хроматы и дихроматы как окислители. Хлорид хрома и хлорохромат калия. Пероксидные соединения хрома и их свойства.

Кислородсодержащие соединения молибдена и вольфрама в состоянии окисления (VI): оксиды, кислоты и их соли, способы получения и свойства.

Соединения молибдена и вольфрама в низших состояниях окисления: оксиды, молибденовые и вольфрамовые «сини». Вольфрамовые бронзы. Полимеризация молибденовой и вольфрамовой кислот; образование изополимолибдатов и изополивольфрамов в твердой фазе и в водных растворах. Гетерополисоединения на основе молибденовой и вольфрамовой кислот, получение, состав и свойства.

Пероксосоединения молибдена и вольфрама.

Применение хрома, молибдена, вольфрама и их соединений.

3.5. Марганец, технеций, рений. Общая характеристика элементов VII-Б группы. Основные минералы. Открытие рения. Синтез технеция. Получение металлических марганца, технеция и рения. Химические свойства металлов.

Соединения марганца (II): оксид, гидроксид, соли, комплексные соединения, получения и свойства.

Соединения марганца (IV): оксид, соли и манганиты; получение и свойства.

Соединения марганца в степенях окисления (VI) и (VII); способы получения и свойства. Производные марганца (V) гипоманганаты, синтез и свойства.

Общие сведения о соединениях технеция и рения в низших (III и IV) и высших (VI) и (VII) состояниях окисления, их состав и свойства.

Семейство железа. Нахождение в природе, способы получения. Доменный процесс получения чугуна. Виды сталей. Переработка чугуна в сталь и ковкое железо. Способы получения кобальта и никеля.

Химические свойства железа, кобальта и никеля. Карбонилы и нитрозилы металлов и их свойства.

Валентные состояния элементов триады железа. Изменение устойчивости их соединений в различных степенях окисления. Соединения в степенях окисления (II) и (III), способы их получения и химические свойства: оксиды, гидроксиды, соли, комплексные соединения. Ферраты как производные железа (VI), получение и свойства ферратов.

3.7.Элементы семейства платиновых металлов. Роль отечественных ученых в изучении химии платиновых элементов (К.К. Клаус, Л.А. Чугаев, И.И. Черняев).

Общая характеристика платиновых элементов. Самородная платина. Извлечение металлов семейства платиновых из руд. Физические и химические свойства металлов, их применение. Закономерности в изменении устойчивости характерных степеней окисления в соединениях платиновых элементов. Свойства соединений элементов семейства платиновых в состоянии окисления (II), (III), (IV), (VI), (VII) и (VIII). Комплексные соединения платиновых элементов и их свойства.

Применение соединений платиновых элементов.

3.7.Медь, серебро, золото. Общая характеристика элементов. Сравнительная характеристика физических и химических свойств простых веществ. Основные минералы, способы получения металлов. Цианидный метод Багратиона. Соединения металлов в состояниях окисления (I), (II), (III): оксиды, гидроксиды, соли, комплексные соединения; способы получения и свойства. Купраты, гидроксокупраты, периодаты и теллулаты меди(III); получение и свойства. Соединения с высшими состояниями окисления серебра. Галогенидные, тиосульфатные, цианидные комплексные соединения; получение, устойчивость, свойства.

3.8.Цинк, кадмий, ртуть. Общая характеристика элементов. Сравнительная характеристика физических и химических свойств простых веществ.

Минералы цинка, кадмия и ртути, способы получения металлов. Химические свойства металлических цинка, кадмия и ртути.

Оксиды, гидроксиды, соли; способы их получения и свойства. Комплексные соединения, их состав, устойчивость и свойства.

Равновесия в водном растворе ($\text{HgCl}_2\text{--NH}_3\text{--NH}_4\text{Cl}$). Амидные соединения ртути. Плавкий и неплавкий белые преципитаты.

Соединения ртути(I): оксид, гидроксид, соли; способы получения и свойства. Реакции диспропорционирования соединений ртути(I).

Комплексные соединения цинка, кадмия и ртути(II); способы получения, состав, устойчивость.

Применение цинка, кадмия и ртути и их соединений.

Раздел 4. Химия f-элементов и их соединений

4.1.Лантаноиды. Общая характеристика элементов. Строение электронных оболочек атомов, характерные валентные состояния, устойчивые степени окисления. Распространенность элементов в природе.

Получение, физические и химические свойства элементов в металлическом состоянии. Оксиды, гидроксиды, соли, двойные и комплексные соединения; получение и свойства, гидролиз солей. Соединения церия(IV), европия (II), иттербия(II); их свойства.

Комплексные соединения с полидентатными лигандами как основа современных методов разделения и очистки редкоземельных элементов.

4.2.Актиноиды. Общая характеристика элементов. Строение электронных оболочек атомов, характерные степени окисления.

Минералы тория (монацит), урана (урановая смоляная руда). Валентные состояния тория, урана. Принципы получения тория и урана из природного сырья.

Металлический торий, уран, их свойства. Оксид, гидроксид тория(IV), галогениды. Безводные и гидратированные соли тория.

Кислородные соединения урана, галогениды урана, соли уранила и четырехвалентного урана, уранаты. Комплексные соединения урана (VI) и (IV).

Соединения нептуния и плутония в высшем состоянии окисления (VII), их свойства. Области применения лантаноидов, актиноидов и их соединений.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4
	Знать:	+	+	+	+
1	– химические свойства элементов различных групп периодической системы и их важнейших соединений;	+	+	+	+
2	– методы теоретического и экспериментального исследования;	+	+	+	+
	– методы химической идентификации веществ;				
	Уметь:				
3	– использовать основные элементарные методы химического исследования веществ и соединений;	+	+	+	+
4	– использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач;	+	+	+	+
	Владеть:				
5	– инструментарием для решения химических задач;	+	+	+	+
6	– теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов;	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>					
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК			

7	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии ОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Химия щелочных металлов и их соединений. Химия элементов подгруппы бериллия и их соединений.	4
2	2	Химия элементов подгруппы бора и их соединений.	4
3	2	Химия углерода, кремния и их соединений.	4
4	2	Химия германия, олова, свинца и их соединений.	4
5	2	Химия азота и его соединений.	4
6	2	Химия фосфора, мышьяка, сурьмы, висмута и их соединений.	4
7	2	Химия серы и ее соединений.	4
8	2	Химия селена, теллура, полония и их соединений.	4
9	2	Химия галогенов и их соединений.	4
10	2	Химия благородных газов и их соединений.	4
11	3	Химия элементов подгруппы скандия, титана, ванадия и их соединений.	4
12	3	Химия хрома, молибдена, вольфрама и их соединений.	4
13	3	Химия железа, кобальта, никеля и их соединений.	4
14	3	Химия меди, серебра, золота и их соединений.	4
15	3	Химия цинка, кадмий, ртути и их соединений.	4
16	4	Химия лантаноидов, актиноидов и их соединений.	4

6.2 Лабораторные занятия

Выполнение лабораторного практикума способствует закреплению материала, изучаемого по дисциплине «*Химия элементов*», а также способствует формированию у студентов навыков экспериментальной работы и развитию навыков исследовательской работы.

Максимальное количество баллов за выполнение лабораторного практикума составляет 20 баллов.

Примеры лабораторных работ и разделы, которые они охватывают

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Часы
1	1.1	Определение карбонатной жесткости воды.	4
2	1.2	Щелочные, щелочноземельные металлы и магний.	4
3	2.1	Бор и алюминий.	4
4	2.2	Углерод и кремний	4
5	2.2	Олово и свинец.	4
6	2.3	Азот.	4
7	2.3	Фосфор, сурьма, висмут.	4
8	2.4	Сера, селен, теллур.	4
9	3.4	Хром, молибден, вольфрам.	4
10	3.5	Марганец, железо, кобальт, никель.	4
11	3.7	Медь, серебро.	4
12	3.8	Цинк, кадмий, ртуть.	4
13		Итоговое занятие	4

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **экзамена** (2 семестр) и лабораторного практикума (2 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 40 баллов), лабораторного практикума (максимальная оценка 20 балла) и итогового контроля в форме **экзамена** (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

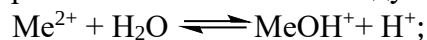
Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 4 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы (2 семестр) составляет 10 баллов за каждую.

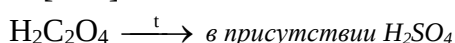
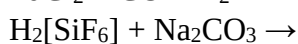
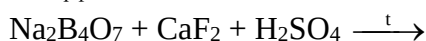
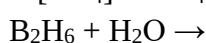
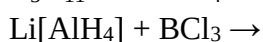
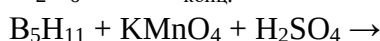
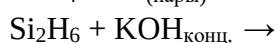
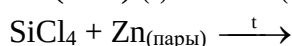
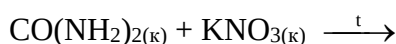
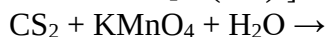
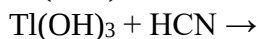
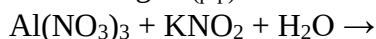
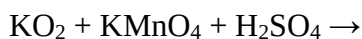
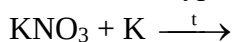
Раздел 1. Контрольная работа №1. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Оценить величины pH 0,05 М растворов солей BeCl_2 , MgCl_2 и CaCl_2 и сопоставить степени гидролиза солей. Для расчетов использовать следующие данные:



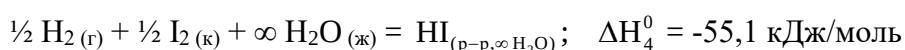
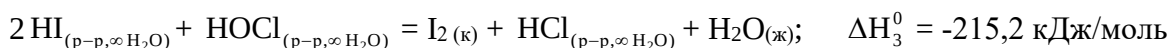
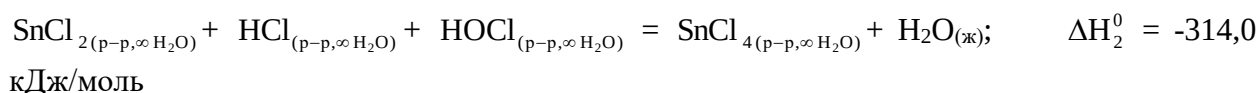
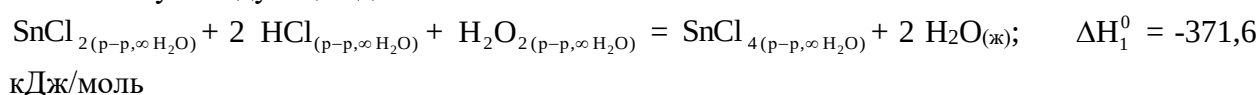
$K_{\text{гидр}}(\text{Be}^{2+}) = 3,0 \cdot 10^{-7}$; $K_{\text{гидр}}(\text{Mg}^{2+}) = 3,8 \cdot 10^{-12}$; $K_{\text{гидр}}(\text{Ca}^{2+}) = 2,5 \cdot 10^{-13}$. Дать интерпретацию полученных результатов.

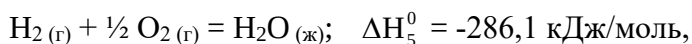
2. Закончить уравнения реакций:



Раздел 2. Контрольная работа №2. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Используя следующие данные





вычислить стандартную энтальпию образования пероксида водорода в водном растворе.

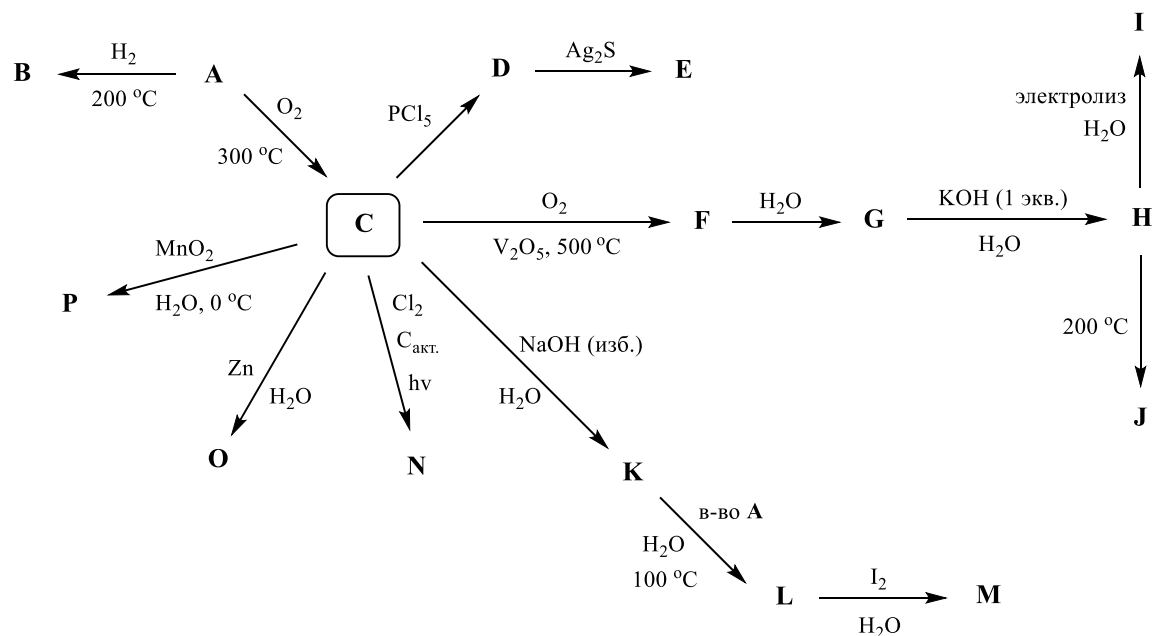
2. Через водный раствор, содержащий 77,00 г метасиликата калия, пропустили 17,82 г галогеноводорода. Выпавший осадок отфильтровали, а полученный раствор выпарили. Масса сухого остатка (в пересчете на безводные соли) составила 86,24 г. Вычислить массовые доли солей в полученном сухом остатке.

Раздел 3. Контрольная работа №3. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. По одной из версий известный политик умер в результате длительного пребывания в комнате с «ядовитыми» обоями. Пигмент, использовавшийся для покраски обоев, получают следующим образом: к горячему раствору карбоната натрия небольшими порциями добавляют белый порошок ядовитого бинарного соединения М, которое известно человечеству еще с античности. Полученный бесцветный раствор по каплям добавляют к раствору медного купороса, что приводит к выпадению осадка ярко окрашенного пигмента. Установите состав вещества М и ядовитого пигмента, если известно, что они содержат 24,24 и 25,53 масс% кислорода как элемента соответственно. Напишите уравнения упомянутых реакций.

2. Довольно распространенный элемент X хорошо известен человечеству ещё с древнейших времен. В природе X содержится в земной коре в виде минералов и в самородном состоянии, а также в природном газе. Кроме того, X входит в состав некоторых аминокислот и ферментов, являясь одним из биогенных элементов.

Благодаря своей способности к катенации (образованию цепей со связями X-X) и разнообразию степеней окисления, X образует множество кислородсодержащих кислот различной устойчивости, являясь рекорсменом по их количеству среди всех элементов Периодической системы. В настоящее время известно много способов синтеза этих кислот и их солей, часть из которых зашифрована в приведенной ниже схеме:



Дополнительно известно, что:

- **A** – простое вещество, **B, C, E, F** – бинарные соединения, остальные вещества содержат три элемента.
- Массовая доля элемента **X** в некоторых веществах составляет: **E** – 80,03 %, **I** – 23,72 %, **M** – 47,46 %, **O** – 33,14 %, **P** – 29,82 % (значения атомных масс взяты с точностью до 0,01 г/моль).
- Соединение **M** содержит два типа атомов **X** в соотношении 1:1.

1. Приведите формулы и названия соединений **A-P** (все они содержат элемент **X**).
2. Напишите уравнения реакций, представленных в схеме.
3. Изобразите структурные формулы соединений **E, I, J, L, M, O, P** (если они являются солью, то приведите структурную формулу соответствующего аниона).

Раздел 2. Контрольная работа №4. Контрольная работа содержит 2 вопроса, по 5 баллов за вопрос.

1. Металл **M** при нагревании в атмосфере угарного газа при 700-900°C дает зеленый оксид **N**, который при длительном нагревании (200-300°C) на воздухе превращается в соединение **O** черного цвета. Дальнейшее прокаливании **O** на воздухе дает последовательно соединения **P** (580-620°C, коричнево-черное) и **R** (850-1100°C, красно-коричневое). **R** при действии избытком графита (1500°C) переходит в карбид **S**.

1. Определите металл **M**, если его содержание в соединениях **N-S** по данным элементного анализа составляет:

N	O	P	R	S
77,45 %	63,19 %	69,60 %	72,03 %	93,21 %

2. Определите объём газа (приведенный к н.у.), который выделится при взаимодействии 1,00 г **S** с соляной кислотой, если известно, что обработка образующегося раствора избытком щелочи приводит к образованию осадка **T**, быстро темнеющего на воздухе.

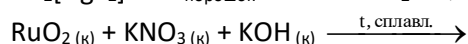
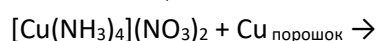
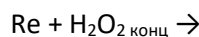
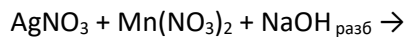
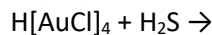
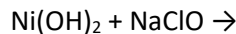
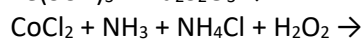
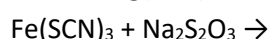
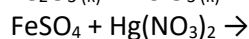
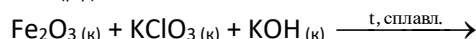
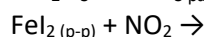
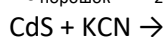
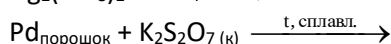
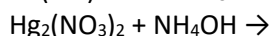
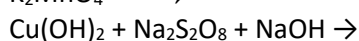
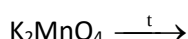
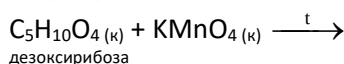
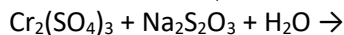
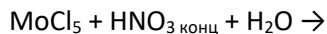
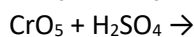
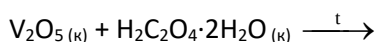
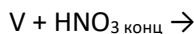
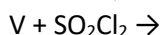
3. Приведите формулы веществ **N-T** и уравнения всех упомянутых превращений.

2. Между хромат – и дихромат-ионами в водном растворе существует равновесие

$$2\text{CrO}_4^{2-} + 2\text{H}^+ \rightleftharpoons \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + \text{H}_2\text{O}$$

Константа равновесия указанного процесса при 25°C равна $4,2 \cdot 10^{14}$. В 1 М растворе 10 % всего хрома как элемента содержится в виде дихромат-иона, а 90 % - в виде хромат-иона. Вычислить pH такого раствора.

4. Закончить уравнения реакций



8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (2 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса, по 20 баллов за каждый.

1. Общая характеристика и химические свойства щелочных металлов.
2. Особенности соединений лития по сравнению с соединениями других щелочных металлов.
3. Гидриды, оксиды, пероксиды, гидроксиды щелочных металлов: химическая связь в соединениях, получение и свойства.
4. Получение натрия, гидроксида натрия и карбоната натрия в промышленности.
5. Взаимодействие с растворами щелочей: а) амфотерных металлов; б) неметаллов; в) кислотных оксидов; г) амфотерных оксидов.
6. Особенности соединений бериллия по сравнению с соединениями щелочно-земельных металлов.
7. Общая характеристика солей бериллия, магния и щелочно-земельных металлов, их растворимость и гидролиз.
8. Получение оксида, гидроксида кальция и хлорной извести в промышленности.
9. Общая характеристика и химические свойства бора, его получение.
10. Борный ангидрид, борные кислоты и их соли: получение, строение и свойства.
11. Бороводороды: получение, строение молекул и свойства. Борогидриды металлов.
12. Общая характеристика и химические свойства алюминия, индия, галлия и таллия.
13. Получение алюминия, его оксида и гидроксида в промышленности.
14. Оксид, гидроксид и соли алюминия: их получение и свойства.
15. Общая характеристика и химические свойства углерода.
16. Оксиды углерода (II, IV): получение в промышленности и в лаборатории, кислотно-основные и окислительно-восстановительные свойства. Карбонилы металлов.
17. Общая характеристика и химические свойства кремния.
18. Получение кремния, силиката натрия и стекла в промышленности.
19. Кварц, кремниевые кислоты, силикаты, гексафторокремниевая кислота: получение и свойства.
20. Общая характеристика и химические свойства германия, олова и свинца.
21. Оксиды и гидроксиды олова и свинца: их взаимодействие с кислотами и щелочами, окислительно-восстановительные свойства.
22. Сульфиды олова и свинца: получение, кислотно-основные и окислительно-восстановительные свойства. Отношение к действию $(\text{NH}_4)_2\text{S}$ и $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2$.
1. Общая характеристика и химические свойства азота.
2. Оксиды азота: получение, строение молекул, окислительно-восстановительные свойства.
3. Аммиак и гидразин: получение, химическая связь и строение молекул, кислотно-основные и окислительно-восстановительные свойства.
4. Реакции термического разложения солей аммония: нитриты, нитрата, бихромата, сульфата, хлорида.

5. Гидроксиламин, азотистоводородная кислота и ее соли: химическая связь и строение молекул, получение и свойства.
6. Взаимодействие металлов с азотной кислотой.
7. Царская водка и её окислительные свойства на примере реакций с золотом, платиной, сульфидом ртути.
8. Реакции термического разложения нитратов различных металлов.
9. Общая характеристика и химические свойства фосфора его получение в промышленности.
10. Оксиды фосфора: получение, строение молекул и свойства.
11. Фосфоновая и фосфиновая кислоты: получение, строение молекул, кислотнo-основные и окислительно-восстановительные свойства. Фосфонаты и фосфинаты.
12. Кислоты фосфора (+5) и качественные реакции на них. Получение фосфорной кислоты в промышленности.
13. Общая характеристика и химические свойства мышьяка, сурьмы и висмута.
14. Сульфиды мышьяка, сурьмы и висмута: их отношение к кислотам и к раствору сульфида аммония. Тиокислоты и их соли.
15. Галогениды мышьяка, сурьмы и висмута: их получение и гидролиз. Тиокислоты и тиосоли.
16. Получение кислорода и пероксида водорода в промышленности и в лаборатории.
17. Реакции пероксида водорода в роли окислителя и восстановителя.
18. Общая характеристика и химические свойства серы, селена и теллура.
19. Получение и свойства сероводорода. Растворимость и гидролиз сульфидов. Отношение сульфидов к кислотам.
20. Кислородсодержащие кислоты серы, селена и теллура: получение, кислотнo-основные и окислительно-восстановительные свойства.
21. Взаимодействие металлов с серной кислотой.
22. Получение серной кислоты и сероводорода в промышленности.
23. Взаимодействие неметаллов с концентрированными серной и азотной кислотами.
24. Получение водорода в промышленности.
25. Общая характеристика и химические свойства галогенов.
26. Получение хлора, брома и хлората калия в промышленности.
27. Водородные соединения галогенов: получение и свойства.
28. Ассоциация молекул фтороводорода. Дифторогидрогенат калия.
29. Окислительное действие хлора и брома в щелочной среде.
30. Оксиды хлора и иода: получение и свойства.
31. Сопоставление кислотнo-основных и окислительно-восстановительных свойств кислородсодержащих кислот галогенов.
32. Получение и гидролиз галогенангидридов.
33. Фториды ксенона: получение, строение молекул и химические свойства.
34. Общая характеристика и химические свойства меди, серебра, золота.
35. Общая характеристика и химические свойства элементов подгруппы цинка.
36. Соли цинка, кадмия и ртути, их гидролиз. Амидные соединения ртути. Соединения $\text{Hg}_2(\text{II})$ получение и свойства.
37. Общая характеристика и химические свойства подгруппы скандия.
38. Общая характеристика и химические свойства металлов подгруппы титана.

39. Общая характеристика и химические свойства элементов подгруппы ванадия.
40. Общая характеристика и химические свойства хрома, молибдена и вольфрама.
41. Соединения хрома (II и III): получение и свойства.
42. Реакции хромата (дихромата) калия с восстановителями в кислой, нейтральной и щелочной средах.
43. Хромовый ангидрид, хроматы и дихроматы: получение и химические свойства. Хромовая смесь.
44. Общая характеристика и химические свойства марганца, технеция и рения.
45. Соединения марганца (II): получение и свойства. Диоксид марганца, манганаты и перманганаты. Марганцовая кислота и ее ангидрид.
46. Реакции перманганата калия с восстановителями в кислой, нейтральной и щелочной средах.
47. Общая характеристика и химические свойства железа, кобальта и никеля.
48. Получение и свойства гидроксидов и солей железа (II и III). Качественные реакции на ионы железа.
49. Общая характеристика и химические свойства платиновых металлов.
50. Общая характеристика и химические свойства лантаноидов.
51. Общая характеристика и химические свойства актиноидов.
52. Получение железа, никеля, хрома и марганца в промышленности.
53. Пирометаллургические способы получения металлов (свинец, медь, цинк) из сульфидных руд.
54. Окислительное действие нитрата калия и хлората калия при нагревании (сплавлении).
55. Образование аммиакатов и гидроксокомплексов металлов и их разрушение кислотами и при нагревании.
56. Реакции термического разложения некоторых кислых солей (NaHCO_3 , NaH_2PO_4 , Na_2HPO_4 , NaHSO_4).

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (2 семестр).

Экзамен по дисциплине «Химия элементов» проводится во 2 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-4 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» _____ (Должность, наименование кафедры) _____ (Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»

	Наименование дисциплины
	Билет № 1 1. Гидратация P_4O_{10}. Фосфорные кислоты и их соли; способы получения и свойства. 2. Общая характеристика элементов подгруппы хрома, их валентные состояния. Основные минералы. Переработка хромистого железняка в дихроматы и феррохром. Способы получения хрома, молибдена и вольфрама; их физические и химические свойства.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Гринвуд Н.Н., Эрншо А. Химия элементов. В 2-х томах. М.Мир.2008.
2. Лекции. Химический факультет МГУ
<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/thermo/welcome.html>.
3. А.В. Шевельков, А.А. Дроздов, М.Е. Тамм. Неорганическая химия. Учебник. Под ред. А.В. Шевелькова.-М.: Лаборатория знаний, 2021-586с. :ил.
4. Практикум по неорганической химии / Под ред. А.Ф. Воробьева и С.И. Дракина. М.: ТИД «Альянс», 2004. 249 с.
5. Власенко К.К., Дупал А.Я., Соловьев С.Н. Домашние задания по общей и неорганической химии. Часть 1. РХТУ им.Д.И. Менделеева. 2015. 186 с.
6. Власенко К.К., Дупал А.Я., Соловьев С.Н. Домашние задания по общей и неорганической химии. Часть 2. РХТУ им.Д.И. Менделеева. 2015. 150 с.

Б. Дополнительная литература

1. Ляшенко С.Е., Шаталов К.И., Кузнецов В.В. Химия s-элементов. РХТУ им. Д.И. Менделеева. 2014. 131 с.
2. Ляшенко С.Е., Шаталов К.И., Кузнецов В.В. Химия р-элементов. Группы бора и углерода. РХТУ им. Д.И. Менделеева. 2015. 295 с.
3. В.В. Кузнецов, Е.А. Филатова, А.А. Алекса. Химия р-элементов. Элементы 15 группы. РХТУ им. Д.И. Менделеева. 2016. 312 с.
4. 8. В.В. Кузнецов, Е.А. Филатова, В.А. Зайцев, К.И. Шаталов. Химия р-элементов. Элементы 16 группы. РХТУ им. Д.И. Менделеева. 2018. 284 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.
- Методические рекомендации по выполнению лабораторных работ.

Полнотекстовые информационные ресурсы:

Издательство ELSEVIER на платформе ScienceDirect.

Доступ к коллекциям «CHEMISTRY» и «CHEMICALENGINEERING» (152 журнала) с 2002 г. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://www.sciencedirect.com>.

Издательство American Chemical Society (ACS)

Издает самые цитируемые химические журналы, по данным ISI Journal Scitation Reports. Журналы по основным разделам химии и смежным областям знаний. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://pubs.acs.org>.

Издательство Taylor & Francis

Более 1300 журналов по всем областям знаний, в том числе по естественным наукам. Охват с 1997 года по настоящее время. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://www.informaworld.com>.

Международная издательская компания Nature Publishing Group (NPG) Доступ к журналам:

«Nature» - с 1997 г. - научное издание широкого профиля, обладающее самым высоким индексом цитирования;

"Nature Chemistry" - с 2010 г.

Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://www.nature.com>.

Издательство Wiley-Blackwell

Предоставляет доступ к более чем 1300 журналам.

Ресурс охватывает широкий спектр тематических направлений по всем областям знаний, в том числе известные журналы по химии. Глубина архива (в основном) с 1996 года. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес для работы: <http://www3.interscience.wiley.com>.

Издательство SPRINGER

Доступ к электронным архивам журналов и электронным книгам. Журналы по всем областям знаний. Адрес для работы: <http://www.springerlink.com>. Доступ по IP-адресам РХТУ.

Журнал SCIENCE

Один из ведущих мультидисциплинарных научных журналов, публикуется Американской ассоциацией по развитию науки (AAAS), содержит обзоры новейших разработок в естественных и прикладных науках, освещает новости научного мира и комментирует их. Охват — с 1997 г. по настоящее время.

Доступ по IP-адресам РХТУ.

Адрес для работы: <http://www.science.com>

The Royal Society of Chemistry

Полные тексты статей журналов Королевского химического общества (Великобритания) и базы данных. Доступ по IP-адресам РХТУ. Адрес:

<http://www.rsc.org/Publishing/Journals/Index.asp>

Российская научная электронная библиотека (<http://www.elibrary.ru>)

Электронные версии журналов российских и зарубежных научных издательств.

Доступ по IP-адресам РХТУ.

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «Химия элементов» проводятся в форме лекций, практических занятий, лабораторных работ и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная средствами демонстрации и учебной мебелью.

Оборудованная лаборатория: аквадистилляторы ДЭ-10 ЭМО; аквадистиллятор АЭ- 25 ООО «Ливам ПФ»», рН-метры с автоматической и ручной компенсацией температуры ИПЛ 301, рН-метр-милливольтметр рН-420; стандарт-титр рН метрия общая ООО «ХИМТИТРЫ», лабораторные электронные весы: весы Citizen Scale CY-223, весы Citizen Scale CY-124C, весы электронные аналитические MB-210A, весы аналитические AND HR-100AG, весы OHAUS V11P15, весы Citizen Scale CY-1202, весы лабораторные ВЛТЭ-510С, весы порционные AND HT-500 (500г, 0,1г, внешняя калибровка), весы Citizen Scale CY-224; колбонагреватель KH-500 Stegler, мешалка магнитная STEGLER HS с подогревом, спектрофотометр однолучевого СФ-104 с разделением светового потока сканирующий, спектрофотометр однолучевой СФ-102 с разделением светового потока 40 ионометр И-510, шкафы сушильные ШС-40-ПЗ; шкаф сушильный (тип 2) ШС-40-02 СПУ мод. 2204, шкаф сушильный (тип 1) ШС-20-02 СПУ мод. 2202, шкаф сушильный (тип 3) ШС-80-02 СПУ мод. 2208 жидкостной циркуляционный термостат BT10-1 (+20...+100 °С), термостат жидкостной LOIP LT 124a; BT3-1 (+20...+100 °С); BT5-1 (+20...+100 °С) жидкостной циркуляционный термостат, 5 л.; электрическая плита IRIT IR-8004 IRIT; столик подъемный лабораторный металлический (тип 1) HB-150 Stegler, сушилка для пробирок (тип 1) 0362A (полипропилен) Stegler, сушилка для пробирок (тип 2) 0362B (полипропилен) Stegler.

Библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева, комплект наглядных материалов.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, ноутбук, принтер и программные средства; проектор и экран; копировальный аппарат; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к Разделам лекционного курса.

Электронные образовательные ресурсы: учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном виде..

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Знает, умеет, владеет необходимо заполнить в соответствии с формулировками п.2 и расстановкой по разделам п.5.

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Химия s-элементов	<i>Знает:</i> – химические свойства элементов различных групп периодической системы и их важнейших соединений; – методы теоретического и экспериментального исследования; – методы химической идентификации веществ; <i>Умеет:</i> – использовать основные элементарные методы химического исследования веществ и соединений; – использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач; <i>Владеет:</i> – инструментарием для решения химических задач; – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов;	Оценка за контрольную работу №1 (2 семестр) Оценка за лабораторный практикум (2 семестр) Оценка за экзамен (2 семестр)
Раздел 2. Химия p-элементов	<i>Знает:</i> – химические свойства элементов различных групп периодической системы и их важнейших соединений; – методы теоретического и экспериментального исследования; – методы химической идентификации веществ; <i>Умеет:</i> – использовать основные элементарные методы химического исследования веществ и соединений; – использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач;	Оценка за контрольную работу №2 (2 семестр) Оценка за экзамен (2 семестр)

	<i>Владеет:</i> – инструментарием для решения химических задач; – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов;	
Раздел 3. Химия d-элементов	<i>Знает:</i> – химические свойства элементов различных групп периодической системы и их важнейших соединений; – методы теоретического и экспериментального исследования; – методы химической идентификации веществ; <i>Умеет:</i> – использовать основные элементарные методы химического исследования веществ и соединений; – использовать основные химические законы, термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач; <i>Владеет:</i> – инструментарием для решения химических задач; – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов;	Оценка за контрольную работу №3 (2 семестр) Оценка за лабораторный практикум (2 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (2 семестр)
Раздел 4. Химия f-элементов	<i>Знает:</i> – химические свойства элементов различных групп периодической системы и их важнейших соединений; – методы теоретического и экспериментального исследования; – методы химической идентификации веществ; <i>Умеет:</i> – использовать основные элементарные методы химического исследования веществ и соединений; – использовать основные химические законы,	Оценка за контрольную работу №4 (2 семестр) Оценка за <i>экзамен</i> (2 семестр)

	термодинамические справочные данные для решения профессиональных задач; <i>Владеет:</i> – инструментарием для решения химических задач; – теоретическими методами описания свойств простых и сложных веществ на основе электронного строения их атомов и положения в периодической системе химических элементов;	

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

« ____ » _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Экономика инноваций»

Направление подготовки 04.03.01. Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО

на заседании Методической комиссии

РХТУ им. Д.И. Менделеева

« ____ » _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры Сколтеха к.э.н. Бондаревым С.А.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасаения энергии»** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Экономика инноваций»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют общую теоретическую и практическую подготовку в области общественных наук.

Цель дисциплины – формирование у студентов комплекса теоретических знаний и практических навыков в сфере экономики, технологического предпринимательства и управления инновационными проектами.

Задачи дисциплины

– познакомить студентов с основными блоками экономической науки: микроэкономикой, макроэкономикой, основами предпринимательства, маркетингом, менеджментом, основами финансового управления и финансового моделирования, роли государства и других институтов в экономике;

– на основе вышеописанной научной базы сформировать у студентов понимание экономики инноваций: их природы, способа управления ими, существующей инновационной среды;

– научить студентов самостоятельно оценивать перспективы превращения изобретения в инновацию: технологические возможности, маркетинговый потенциал, оценка инновационной привлекательности проекта;

– научить студентов самостоятельно составлять описание и финансовую модель инновационного проекта, в форме необходимой и достаточной для привлечения внешнего финансирования.

Дисциплина **«Экономика инноваций»** преподается в 7 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Универсальные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) УК	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК
Командная работа и лидерство	УК-3. Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде	УК-3.1. Определяет свою роль в социальном взаимодействии и командной работе, исходя из стратегии сотрудничества для достижения поставленной цели УК-3.2. При реализации своей роли в социальном взаимодействии и командной работе учитывает особенности поведения и интересы других участников; УК-3.3. Анализирует возможные последствия личных действий в социальном взаимодействии и командной работе, и с учетом этого строит продуктивное взаимодействие в коллективе; УК-3.4. Осуществляет обмен информацией, знаниями и опытом с членами команды; оценивает идеи других членов команды для достижения поставленной цели; УК-3.5. Соблюдает нормы и установленные правила командной работы; несет личную ответственность за результат

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-7. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических и гибридных соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-7.1. Знает современные методы, используемые при проектировании направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономичных и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами
			ПК-7.2. Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения направленного синтеза органических и гибридных соединений по заданию специалиста более высокой квалификации	
			ПК-7.3. Владеет приёмами обработки, анализа, интерпретации результатов эксперимента по проведению направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданными свойствами	

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- Основы предпринимательства и управления фирмой
- Основы финансового управления и моделирования

Уметь:

- Планировать и проектировать коммерциализацию результатов интеллектуальной деятельности
- Формировать проектную команду
- Анализировать потребительское поведение и прогнозировать продажи
- Проводить оценку эффективности инновационной деятельности

Владеть:

- Приёмами работы на рынке коммерциализации инновационных технологий
- Технологией бережливого стартапа
- Технологией разработки финансовой модели проекта

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	
Самостоятельная работа	1,2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,2	0,2	0,15
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43,8	32,85
Вид контроля:			
Вид итогового контроля:	зачёт		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лек-ции	Прак. зан.	Лаб. работы	Сам. работа
1.	Раздел 1. Введение в экономику.	63	18	18	-	27
1.1	Микроэкономика	7	2	2	-	3
1.2	Макроэкономика	7	2	2	-	3
1.3	Основы предпринимательства	7	2	2	-	3
1.4	Маркетинг	7	2	2	-	3
1.5	Менеджмент	7	2	2	-	3
1.6	Основы финансового управления	7	2	2	-	3
1.7	Основы финансового моделирования	7	2	2	-	3
1.8	Экономические и неэкономические воздействия		2	2	-	3
1.9	Институционализм и поведенческая экономика	7	2	2	-	3
2.	Раздел 2. Инновационное развитие.	45	14	14	-	17
2.1	Введение в инновационное развитие	7	2	2	-	3
2.2	Инновация как проект	7	2	2	-	3
2.3	Инновационная среда	7	2	2	-	3
2.4	Подготовка презентации инновационных проектов	12	4	4	-	4
2.5	Итоговая презентация инновационных проектов	12	4	4	-	4
	ИТОГО	108	32	32	-	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Введение в экономику.

1.1. Микроэкономика

Предпочтения потребителя, предположения о них. Функция полезности, её свойства и кривые безразличия. Бюджетное ограничение. Оптимум потребителя. Вид функции индивидуального спроса, однородность как её свойство. Сравнительная статистика: кривая «цена-потребления» и кривая спроса. Обыкновенные товары и товары Гиффена. Сравнительная статистика: кривые «доход-потребление» и кривые Энгеля. Нормальные товары и товары низшей категории. Эффект дохода и эффект замещения, перекрёстные эффекты. Выгода потребителя: маршаллианский потребительский избыток, компенсирующая величина дохода, эквивалентная вариация дохода. Концепция выявленных предпочтений. Анализ индексов доходов и цен. Индивидуальный и рыночный спрос. Прямая эластичность спроса по цене. Эластичность спроса по доходу. Перекрестная эластичность спроса по цене. Производственная функция. Эффект масштаба. Издержки производства. Принципы минимизации издержек. Максимизация прибыли и предложение конкурентной фирмы. Кривая предложения конкурентной фирмы. Излишек производителя в коротком и длинном периодах. Кривая долгосрочного предложения фирмы. Рынки факторов производства. Предложение конкурентной отрасли в кратко- и долгосрочных периодах, долгосрочное равновесие отрасли в зависимости от структуры издержек. Понятие эластичности предложения. Совершенная конкуренция как базовая модель: взаимодействие спроса и предложения и экономическая эффективность. Понятие монополии как рыночной структуры и условия её существования.

Монополистическое ценообразование. Способы ценообразования и ценовая дискриминация. Понятие олигополии как рыночной структуры. Рыночные модели со сговором: картель, модель ценового лидерства доминирующей фирмы. Модели монополистической конкуренции.

1.2. Макроэкономика

Основные макроэкономические показатели и способы их измерения. Открытая экономика. Модели открытой экономики с совершенной и несовершенной мобильностью капитала. Эффективность экономической политики государства в открытой экономике. Государственный долг: традиционный взгляд и барро-рикардианский подход. Дефицит государственного бюджета: причины возникновения и проблемы измерения. Модели платёжеспособности по внутреннему и внешнему государственному долгу. Инфляция и кредитно-денежная политика. Природа денег и их основные свойства. Роль банков в современной экономике. Поведение экономических агентов и борьба с инфляцией. Безработица: причины и борьба с ней. Экономический рост. Модели эндогенного и экзогенного экономического роста: модели Солоу, АК, Ромера, растущего разнообразия товаров, ступенек качества, заимствованных технологий, Рамсея, пересекающихся поколений. Детерминированные экономические циклы. Стохастические экономические циклы. Политические циклы. Проблемы осуществления макроэкономической политики.

1.3. Основы предпринимательства

Фирма как основной субъект предпринимательской деятельности. Внешняя среда фирмы и экономическая устойчивость предпринимательских структур. Модели функционирования фирмы в рыночной среде. Организационная структура фирмы и принципы управления. Основные средства и нематериальные активы. Оборотные средства фирмы. Персонал фирмы. Финансовые ресурсы и финансирование бизнеса. Расходы фирмы и себестоимость продукции. Доходы фирмы. Взаимосвязь «издержки – выручка – прибыль». Ценообразование и ценовая политика фирмы. Налогообложение фирмы. Основы налогового законодательства РФ. Экономическая эффективность деятельности фирмы. Инвестиционная деятельность фирмы. Инновационное развитие фирмы. Планирование в деятельности фирмы. Информационные системы управления фирмой.

1.4. Маркетинг

Определение маркетинга. Концепции управления маркетингом. Цели системы маркетинга. Анализ рыночных возможностей. Отбор целевых рынков. Разработка комплекса маркетинга. Системы маркетинговых исследований и маркетинговой информации. Понятие маркетинговой среды. Основные факторы микро- и макросреды функционирования фирмы. Процесс принятия потребителем решения о покупке товара. Различные варианты принятия решения о покупке товара-новинки. Рынок предприятий и поведение покупателей от имени предприятий. Сегментирование рынка. Выбор целевых сегментов рынка. Позиционирование товара на рынке. Разработка товаров: товары, товарные марки, упаковка, услуги. Стратегии разработки новых товаров. Подход к этапам жизненного цикла товара. Установление цен на товары: задачи и политика ценообразования. Методы распространения товаров: каналы распределения и товародвижения, розничная и оптовая торговля. Продвижение товаров: стратегия коммуникации, реклама, стимулирование сбыта и пропаганда. Продвижение товаров: личная продажа и управление сбытом. Стратегическое маркетинговое планирование. Международный маркетинг. Маркетинг услуг. Маркетинг и общество. Инструменты стратегического маркетингового планирования. Инструменты операционного маркетинга.

1.5. Менеджмент

Общая характеристика менеджмента. Теоретические взгляды на природу, сущность и развитие управления. Одномерные и синтетические учения об управлении. Модели взаимодействия человека и организационного окружения. Вхождение человека в организацию. Ролевой аспект взаимодействия человека и организации. Личностный аспект взаимодействия человека и организационного окружения. Взаимодействие человека и группы. Адаптация человека к организационному окружению и изменение его поведения. Общая характеристика мотивации деятельности. Теории содержания мотивации. Теории процесса мотивации. Общая характеристика стратегического управления организацией. Анализ внешней и внутренней среды. Миссия и цели организации. Типы стратегий бизнеса. Выработка стратегии бизнеса. Выполнение принятой стратегии. Проектирование работы в организации. Проектирование организации. Типы организаций. Организационные процессы: коммуникация в управлении, принятие решений, власть и влияние, управление конфликтом. Организационная культура. Общая характеристика лидерства.

1.6. Основы финансового управления

Роль денег в условиях кругооборота доходов и товаров. Денежное обращение и денежная система. Финансы и финансовая система. Бюджет и бюджетная система РФ, внебюджетные фонды. Основные финансовые показатели на предприятии. Страхование как финансовая категория. Кредит и кредитная система РФ. Фондовые рынки: акции, облигации, IPO, сырьевые фондовые рынки, рынок FOREX, фьючерсы, опционы и прочие производные финансовые инструменты, инвестиционные и хедж-фонды. Основные положения бухгалтерского, налогового и управленческого учёта. Принцип двойной записи. Основные отличия различных систем учёта. Основные формы финансово-экономической отчётности: отчёт о прибылях и убытках, бухгалтерский баланс, отчёт о движении денежных средств. Связь между тремя основными формами финансово-экономической отчётности. Анализ отчёта о прибылях и убытках. Анализ бухгалтерского баланса. Анализ отчёта о движении денежных средств.

1.7. Основы финансового моделирования

Методы построения финансовой модели и её анализа. Настройка исходных данных/параметров и раздела первичного ввода информации. Построение финансовой модели как инструмента управления компанией. Модель продаж: отгрузка товара и поступление денежных средств. Финансовые модели производственных процессов. Прогнозирование CAPEX и OPEX. Вариативность моделей. Формирование целостной модели с учётом вариантов и сценарного анализа. Аналитический раздел модели и система поддержки принятия решений. Вывод основных данных в виде трёх основных форм финансово-экономической отчётности. Расчёт основных финансовых коэффициентов и оценка стоимости.

1.8. Экономические и неэкономические воздействия

Органические концепции происхождения государства: Конта, Спенсера. Договорные (естественно-правовые) концепции происхождения государства: Гроция, Гоббса, Локка. Насильственные концепции происхождения государства: Дюринга, Гумпловича, Оппенгеймера, Каутского, Олсона. Иные концепции происхождения государства. Ограничения экономического воздействия в управлении. Внеэкономическое воздействие в управлении. Современная либерально-юридическая теория государственного управления и её системные ограничения. Понятие общественных благ. Признаки общественных благ. Спрос на общественные блага. Роль государства в обеспечении предложения общественных благ. Трагедия антиобщин. Диллема заключённого. Проблема безбилетника. Пенсионная системы: возникновение, виды, проблемы. Демократия, экономический рост, государственный бюджет и встроенные структурные проблемы с

точки зрения экономики. Диктатура, экономический рост и внеэкономические способы управления обществом, встроенные структурные проблемы с точки зрения экономики. Осуществление государством конкурентной политики: обоснования, способы осуществления, проблемы. Осуществление государством промышленной политики и политики опережающего развития: обоснования, способы осуществления, проблемы. Теории внешней торговли. Эффекты «голландской болезни» и «разоряющего роста». Внешнеторговая политика государства: пошлины, квоты, субсидии, компенсации. Международное перемещение факторов производства. НеокOLONиализм и неравноценный товарно-денежный обмен. Валютные курсы. Платёжный баланс. Глобальная демографическая проблема.

1.9. Институционализм и поведенческая экономика

Теория институтов: понятие, структура, виды. Теория игр и её применение в институциональном анализе. Теория прав собственности. Теория транзакций и транзакционных издержек. Теория контрактов. Неоинституциональный подход к теории фирмы. Институциональная теория государства. Теория общественного выбора. Эволюционная теория институтов. Введение в поведенческую экономику. Понятие рациональности и основанные на ней методы принятия решений. Альтернативные теории принятия решений. Поведенческая теория игр. Поведенческие финансы. Эвристики или экспериментальные правила. Экспериментальная экономика. Неэффективность рынков, выявленная экспериментальным путём. Модели, основанные на убеждениях и предпочтениях инвесторов.

Раздел 2. Инновационное развитие.

2.1. Введение в инновационное развитие

Сущность и свойства инноваций. Разница между изобретением и инновацией. Модели инновационного процесса. Модель инновационного процесса «технологический толчок». Модель инновационного процесса «давление рыночного спроса». Линейная и интерактивные модели инновационного процесса. Инновационный процесс и инновационная деятельность. Соответствие бизнес-модели инновационному процессу. Роль предпринимателя в инновационном процессе. Классификация инноваций. S-кривые. Поддерживающие и прорывные инновации. Инновации и экономические циклы.

2.2. Инновация как проект

Возникновение бизнес-идеи. Создание бизнес-модели. Формализация бизнес-модели. Концепции бизнес-моделей по Джонсону, Кристенсену и Кагерманн. Создание бизнес-модели по Остервальдеру и Пенье. Трансформация бизнес-модели в бизнес-план. Стратегическая последовательность при формировании стратегии голубого океана. Стратегическая канва как метод визуализации стратегии голубого океана. Особенности рынков инновационных продуктов/услуг. Факторы конкуренции на рынке инновационных продуктов/услуг. Основные группы потребителей на рынке инновационных продуктов/услуг. Пропась Мура. Особенности маркетинговых исследований для высокотехнологичных стартапов. Методы моделирования потребительских потребностей. Оценка рынка и целевой сегмент. Специфика позиционирования на рынке инноваций. Модель «целостный продукт». Уровни готовности технологий. Теория решения изобретательских задач. Теория ограничений. Умный жизненный цикл продукта. Формирование стратегии выхода на рынки инновационных продуктов/услуг.

Понятие команды и основные игроки команды инновационного процесса. Team design: принципы формирования, расстановка, мотивация и динамика развития команды инновационного процесса. Риски инновационного процесса, обусловленные человеческим фактором. Мотивация команды. Стадии проекта и трансформация команды инновационного проекта. Развитие команды. Методики создания и развития стартапа

Стадии жизненного цикла инновационной компании. Практика стимулирования изобретательства и инноваций в крупных инновационных компаниях (хайтек-корпорациях). Выведение разработанного в корпорации продукта в основной контур организации. Приобретение и ассимиляция сторонних инновационных компаний. Мировой рынок НИОКР и открытые инновации. Процесс формирования коммерческого предложения для НИОКР-контракта. Проведение переговоров для заключения контракта с индустриальным заказчиком. Типология рисков проекта. Риск-менеджмент. Оценка рисков. Карта рисков инновационного проекта.

2.3. Инновационная среда

Сущность и структура национальных инновационных систем. Государственная инновационная политика. Элементы инновационной инфраструктуры. Концепция инновационного потенциала. Трансфер технологий. Типы лицензирования инновационной деятельности и их применение. Расчёт стоимости лицензии и виды платежей. Понятие и сущность интеллектуальной стоимости. Классификация объектов интеллектуальной собственности. Виды интеллектуальных прав. Основные способы защиты объектов интеллектуальной собственности. Патентование и режим коммерческой тайны. Нематериальные активы инновационной компании. Ключевые игроки в оценке эффективности и стоимости бизнеса. Подходы к оценке эффективности/стоимости на разных этапах развития инновационной компании. Основные показатели эффективности инвестиционного проекта: чистая приведённая стоимость (NPV), внутренняя норма доходности (IRR), срок окупаемости (DPP), индекс прибыльности (PI), рентабельность на вложенный капитал (ROI и ROE). Характеристика источников финансирования инновационной деятельности. Инструменты и механизмы финансирования инновационной деятельности. Доступность источников финансирования инновационной деятельности на различных стадиях жизненного цикла. 4F. Венчурное и бизнес-ангельское финансирование: сходства и различие. Финансирование за счёт кредитных средств. IPO. Финансирование инновационного процесса в рамках существующих компаний.

2.4. Подготовка презентации инновационных проектов

Общая структура эффективных презентаций. Требования к структуре финансовой модели. Настройка исходных данных/параметров и раздела первичного ввода информации. Модель продаж: отгрузка товара и поступление денежных средств. Финансовые модели разработки инновационного продукта и производственных процессов. Прогнозирование CAPEX и OPEX. Формирование целостной модели с учётом вариантов и сценарного анализа. Аналитический раздел модели и система поддержки принятия решений. Вывод основных данных в виде трёх основных форм финансово-экономической отчётности. Расчёт основных финансовых коэффициентов и оценка стоимости проекта. Резюме бизнес-плана. Описание команды проекта в бизнес-плане. Описание продукта в бизнес-плане. Маркетинговый план в бизнес-плане. Организационный план в бизнес-плане. Оценка экономической эффективности проекта в бизнес-плане. Предложение инвестору в бизнес-плане. Риски инновационного проекта в бизнес-плане.

2.5. Итоговая презентация инновационных проектов

Презентация групповых проектов. Разбор подготовленных студентами групповых проектов

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2
	Знать:			
1	– Основы предпринимательства и управления фирмой		+	
2	– Основы финансового управления и моделирования			+
	Уметь:			
3	– Планировать и проектировать коммерциализацию результатов интеллектуальной деятельности		+	
4	– Формировать проектную команду		+	
	– Анализировать потребительское поведение и прогнозировать продажи			+
	– Проводить оценку эффективности инновационной деятельности			+
	Владеть:			
5	– Приёмами работы на рынке коммерциализации инновационных технологий		+	+
6	– Технологией бережливого стартапа		+	+
	– Технологией разработки финансовой модели проекта		+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Универсальные и Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>				
	Код и наименование УК	Код и наименование индикатора достижения УК		
7	УК-3. Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде	УК-3.1. Определяет свою роль в социальном взаимодействии и командной работе, исходя из стратегии сотрудничества для достижения поставленной цели	+	+
		УК-3.2. При реализации своей роли в социальном взаимодействии и командной работе учитывает особенности поведения и интересы других участников;	+	+

		УК-3.3. Анализирует возможные последствия личных действий в социальном взаимодействии и командной работе, и с учетом этого строит продуктивное взаимодействие в коллективе;	+	+
		УК-3.4. Осуществляет обмен информацией, знаниями и опытом с членами команды; оценивает идеи других членов команды для достижения поставленной цели;	+	+
		УК-3.5. Соблюдает нормы и установленные правила командной работы; несет личную ответственность за результат	+	+
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК		
8	ПК-7. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических и гибридных соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-7.1. Знает современные методы, используемые при проектировании направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи	+	+
		ПК-7.2. Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения направленного синтеза органических и гибридных соединений по заданию специалиста более высокой квалификации	+	+
		ПК-7.3. Владеет приемами обработки, анализа, интерпретации результатов эксперимента по проведению направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданными свойствами	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Микроэкономика	2
2	1	Макроэкономика	2
3	1	Основы предпринимательства и экономика фирмы	2
4	1	Маркетинг	2
5	1	Менеджмент	2
6	1	Управление финансами	2
7	1	Финансовое моделирование	2
8	1	Не экономика в экономике	2
9	2	Изобретения и инновации	2
10	2	Бизнес-идея, бизнес-модель, бизнес-план	2
11	2	Разработка продукта и выведение его на рынок	2
12	2	Командообразование	2
13	2	Государство и инновации	2
14	2	Оценка стоимости бизнеса и инвестиционного проекта	2
15	2	Подготовка презентации инновационного проекта	2
16	2	Презентация инновационного проекта	2

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку **реферативной работы** (7 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов), и реферативно-аналитической работы (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

1. Эластичность потребления по цене и ценовая дискриминация.
2. Совершенная конкуренция, олигополия, монополия, монополистическая конкуренция, картельный сговор, монопсония.
3. Теория человеческого капитала
4. Понятие отказов рынка
5. Теории внешней торговли: абсолютных и сравнительных преимуществ. Современное переосмысление теорий.
6. Модели инновационных процессов
7. Концепции бизнес-моделей
8. «Пропасть Мура» при выведении инновационных продуктов на рынок.
9. Риски инновационного проекта, обусловленные человеческим фактором
10. Ключевые игроки в оценке эффективности и стоимости инновационного бизнеса
11. Характеристика источников финансирования инновационной деятельности.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольные работы и проект. Максимальная оценка за контрольные работы составляет по 20 баллов за каждую. За проект 40 баллов. Максимальная оценка за контрольные работы и проект составляет 100 баллов.

Раздел 1. Примеры вопросов и задач к контрольной работе № 1. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 4 вопроса и 2 задачи. По 3 балла за каждый вопрос и по 4 балла за каждую задачу.

Примеры вопросов:

1. Товары Гиффена. Что это такое и с чем связан эффект их возникновения?
2. Ценовая дискриминация. Что это такое и как использовать?
3. Что такое барьеры входа на рынок?
4. В чём отличие олигополии от монополистической конкуренции?

Примеры задач:

1. Фирма «Альфа» вложила в разработку нового продукта 1500 тыс.руб. Переменные затраты на 1 шт. продукции – 1 тыс. руб., постоянные затраты – 600 тыс.руб. Рыночная цена на продукт – 2 тыс. руб. Каким должен быть объём продаж по рыночной цене, чтобы была достигнута точка операционной безубыточности? Каким должен быть объём продаж по рыночной цене, чтобы фирма полностью вернула вложенные в разработку продукта инвестиции?
2. Предположим, что строительная отрасль находится в равновесии при цене 1 000 долларов США за 1 квадратный метр. Строительным подрядчикам предлагается субсидия в размере 100 долларов США на 1 квадратный метр застройки. Если считать, что строительство – это конкурентная отрасль с постоянными издержками, то как в длительном периоде изменится равновесная цена 1 квадратного метра застройки? Объясните свой ответ.

Раздел 2. Примеры вопросов и задач к контрольной работе № 2. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 4 вопроса и 2 задачи. По 3 балла за каждый вопрос и по 4 балла за каждую задачу.

Примеры вопросов:

1. Общественные блага. Каковы их свойства?
2. Что такое налоговый щит?
3. Какой феномен развития компании называют кладбищем роста? С чем связан этот эффект?
4. В чём преимущества и недостатки дирижистской бизнес-модели организации бизнеса?

Примеры задач:

1. Нарисуйте отчёт о прибылях и убытках компании, если известно, что выручка составила 1 млн. рублей, себестоимость произведённой продукции 0,4 млн. руб., затраты на персонал, включая страховые взносы 0,5 млн.руб., амортизация основных средств – 0,1 млн.руб.
2. Нарисуйте баланс компании, если известно, что взносы акционеров в уставной капитал равны 0,1 млн.руб., внеоборотные активы 2 млн.руб., оборотные активы 3 млн. руб., долгосрочные займы – 1 млн. руб., кредиторская задолженность 3 млн. руб.

Раздел 3. Примеры вопросов и задач к контрольной работе № 3. Максимальная оценка – 20 баллов. Контрольная работа содержит 5 заданий. По 4 балла за каждое задание.

Примеры заданий:

1. Объясните, почему крупные компании часто не инвестируют свои ресурсы в разработку подрывных продуктов? И почему небольшим фирмам удается овладеть подрывными инновациями, а потом иногда и подорвать бизнес крупной компании? Приведите примеры подрывных инноваций в знакомой вам отрасли экономики.
2. Что из нижеперечисленного относится к объектам интеллектуальной собственности? Объектами какого вида прав (авторского, патентного и др.) они являются, и как их можно защитить:
 - текст перевода английского романа на русский язык;
 - карта Оренбургской области, составленная картографом Ивановым;
 - химическая формула лекарства «Неболейка»;
 - формула площади равнобедренного треугольника;
 - текст закона Российской Федерации «О поддержке малых предприятий»;
 - способ клонирования клеток медузы;
 - наименование «Всемирная организация здравоохранения»;
 - наименование изделий «Гжель»;
 - сборник стихов немецких поэтов XIX века, составленный К. Лемме;

- авторский метод нанесения рисунка на синтетические ткани?
3. Назовите риски инновационного проекта, обусловленные человеческим фактором. Какие управленческие инструменты их минимизации вы знаете?
 4. Проведите сравнительный анализ венчурного и бизнесангельского финансирования по следующим характеристикам, приведенным в таблице. Заполните таблицу. Обоснуйте свои ответы:

Характеристика деятельности	Бизнес-ангелы	Венчурные фонды
Мотивация		
Источники инвестирования		
Средний размер инвестиций		
Объект инвестиций		
Характер процедуры due diligence		
Участие в управлении компанией		

5. Имеются следующие данные о работе ЗАО «Химбудпроект» за 2020 г. (тыс. руб.):

- Выплата дивидендов – 35 000
- Приобретение земли – 14 000
- Выплата процентных платежей за приобретённое по кредиту оборудование – 10 000
- Выплата заработной платы - 45 000
- Продажа оборудования – 38 000
- Погашение обыкновенных акций – 25 000
- Приобретение оборудования – 30 000
- Выплата поставщикам – 85 000
- Оплата товаров покупателями – 250 000
- Денежные средства на начало года – 50 000

Определите:

- денежный поток от операционной, инвестиционной и финансовой деятельности
- денежные средства на конец года

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

А. Основная литература

1. Экономика инноваций: Курс лекций. – Экономический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2014
2. Экономика инноваций: макро- и мезоуровень: Учебник. Матвеева Л. – Южный федеральный университет, 2021

3. Методические указания по написанию и оформлению курсовых работ по дисциплине «Оценка стоимости бизнеса»: Учебно-методическое пособие. Макушева Ю. А., Павлова И. А. – Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2019
4. Практики студента магистратуры направления подготовки «Научные технологии и экономика инноваций»: Учебно-методическое пособие. – Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, 2019

Б. Дополнительная литература

1. Экономикс. Принципы, проблемы и политика. Том 1. Макконелл К., Брю С. – Республика, 1995
2. Экономикс. Принципы, проблемы и политика. Том 2. Макконелл К., Брю С. – Республика, 1995
3. Микроэкономика. Продвинутый уровень: учеб. пособие. Севастьянова Н.Б., Безденежных М.М. – Новосибирский государственный технический университет, 2015
4. Микроэкономика. Индивидуальное поведение и стратегическое взаимодействие участников рынка. Учебное пособие. Тиссен Е., Борисов И. – Флинта, 2017
5. Макроэкономика (продвинутый уровень). Практикум: Учебно-методическое пособие. Малкина М. – Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2018
6. Экономика фирмы: учебник. – Экономический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2006
7. Основы предпринимательской деятельности: учеб. пособие. Стребкова Л. – Новосибирский государственный технический университет, 2017
8. Основы маркетинга. Котлер Ф. – Издательский дом «Вильямс», 2003.
9. Менеджмент: учебное пособие. Столярова И. - Издательство "ФЛИНТА", 2021
10. Менеджмент в предпринимательстве. Казанцев А. – Инфра-М, 2003.
11. Стратегический менеджмент: учебник для вузов. Фомичев А. – Издательство "Дашков и К", 2016
12. Настольная книга финансового директора. Брег С. – Издательство "Альпина Паблишер", 2016.
13. Институциональная экономика: Новая институциональная экономическая теория: учебник. – Экономический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2011.
14. Основы экономики общественного сектора: Учебное пособие. Гриневич Ю. – Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2018
15. Мировая экономика. Краткий курс: Учебное пособие. Веснин В., Поникаров В. – Издательство "Проспект", 2017
16. Экономика мирохозяйственных связей. Линдерт П. – Прогресс, 1992
17. Экономика и организация производства в дипломном проектировании: учеб. пособие. Юзов О., Щепилов Ф., Шлеев А. – Металлургия, 1991
18. Особенности развития предприятия в инновационной экономике. Иващенко Н., Зайцева А. – Первое экономическое издательство, 2011
19. Инвестиции и инновации в реальном секторе экономики: состояние и перспективы: сборник научных статей. Тютюкина Е. – Издательство "Дашков и К", 2016

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Ресурсы информационно–телекоммуникационной сети Интернет:

- <https://lei.hse.ru>
- <http://projectimo.ru/innovatika>

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

- сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Экономика инноваций»* проводятся в форме лекций, практических занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Лекционная учебная аудитория, оборудованная доской с мелом или маркером и учебной мебелью; учебная аудитория для проведения практических (семинарских) занятий, оборудованная доской с мелом или маркером; библиотека, имеющая рабочие компьютерные места для студентов, оснащенные компьютерами с доступом к базам данных и выходом в Интернет.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проекторы и экраны; цифровые камеры; копировальные аппараты; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Наименование раздела	<i>Знает:</i> – Основы предпринимательства и управления фирмой <i>Умеет:</i> – Планировать и проектировать коммерциализацию результатов интеллектуальной деятельности – Формировать проектную команду <i>Владеет:</i> – Приёмами работы на рынке коммерциализации инновационных технологий – Технологией бережливого стартапа – Технологией разработки финансовой модели проекта	Оценка за контрольную работу №1,2 (7 семестр) Оценка за <i>реферат</i> (7 семестр)
Раздел 2. Наименование раздела	<i>Знать:</i> – Основы финансового управления и моделирования <i>Уметь:</i> – Анализировать потребительское поведение и прогнозировать продажи – Проводить оценку эффективности инновационной деятельности <i>Владеть:</i> – Приёмами работы на рынке коммерциализации инновационных технологий – Технологией бережливого стартапа – Технологией разработки финансовой модели проекта	Оценка за контрольную работу №3 (7 семестр) Оценка за <i>реферат</i> (7 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Электрохимическое материаловедение»

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом кафедры Сколтеха к.х.н. Лауринавичюте В. К.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева

«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«Электрохимическое материаловедение»** относится к обязательной части дисциплин учебного плана. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области квантовой химии, физической химии.

Цель дисциплины – сформировать у учащихся целостное представление о природе электрохимических процессов с участием твердых веществ.

Задачи дисциплины

- дать обзор современных представлений о строении заряженных межфазных границ,
- сформировать представления о кинетике электрохимических реакций и научить экспериментальным методам ее исследования.
- дать представление о современных методах исследования электрохимических процессов.

Дисциплина **«Электрохимическое материаловедение»** преподается в 7 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Наименование категории (группы) ОПК	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК
Общепрофессиональные навыки	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов
	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- современные представления о строении заряженных границ металл-раствор и полупроводник-раствор
- современные представления о кинетике электрохимических реакций с участием твердых веществ.

Уметь:

- выбрать адекватный метод исследования и рассчитать характерные параметры электрохимических реакций
- провести выбор электрохимических нанотехнологий для получения гибридных материалов

Владеть:

- современными экспериментальными и расчетными методами в области электрохимического материаловедения

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	6	216	162
Контактная работа – аудиторные занятия:	3,6	128	97,2
Лекции	1,8	64	48,6
Практические занятия (ПЗ)	1,8	64	48,6
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,4	52	37,8
Контактная самостоятельная работа	1,4		
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		52	37,8
Вид контроля:			
Экзамен	1	36	27
Контактная работа – промежуточная аттестация	1,4	0,4	0,3
Подготовка к экзамену.		35,6	26,7
Вид итогового контроля:	экзамен		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Прак. зан.	Сам. работа
1.	Раздел 1. Строение заряженных межфазных границ	44	16	16	12
1.1	Электрохимические системы	11	4	4	3
1.2	Скачки потенциала на межфазных границах	11	4	4	3
1.3	Основные модельные представления о строении двойного электрического слоя	11	4	4	3
1.4	Адсорбция с переносом заряда	11	4	4	3
2.	Раздел 2. Основы массопереноса в электрохимических системах.	44	16	16	12
2.1	Суммарный поток и его составляющие	11	4	4	3
2.2	Вольтамперометрия обратимых электрохимических систем	11	4	4	3
2.3	Нестационарная диффузия в электрохимических системах	11	4	4	3
2.4	Особенности массопереноса в твердой фазе	11	4	4	3
3.	Раздел 3. Основы электрохимической кинетики и методы исследования электрохимических реакций	46	16	16	14
3.1	Кинетика элементарного акта переноса электрона	11	4	4	3
3.2	Кинетика сложных электрохимических реакций	17,5	6	6	5,5
3.3	Электрохимическая коррозия и защита от коррозии	17,5	6	6	5,5
4.	Раздел 4. Основы электрохимических нанотехнологий	46	16	16	14
4.1	Процессы и методы в электрохимических технологиях	17,5	6	6	5,5
4.2	Электрокатализ	17,5	6	6	5,5
4.3	Литий-ионный и литий-кислородный источники тока	11	4	4	3
	ИТОГО	180	64	64	52
	Экзамен	36			
	ИТОГО	216			

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Строение заряженных межфазных границ

1.1. Электрохимические системы.

Предмет электрохимии. Типы электрохимических систем (гальванический элемент и электролизер). Определение катода и анода. Ток, протекающий через межфазную границу: фарадеевский ток и ток заряжения двойного электрического слоя. Закон Фарадея.

1.2. Скачки потенциала на межфазных границах.

Поверхностный, внутренний и внешний потенциалы. Гальвани- и вольт- потенциал. Проблема абсолютного скачка потенциала (проблема Вольта). Электродный потенциал. Уравнение Нернста.

1.3. Основные модельные представления о строении двойного электрического слоя. Строение заряженной межфазной границы по Грему. Расчет компонентов поверхностного заряда и скачков потенциала в двойном электрическом слое. Понятие идеально-поляризуемого и неполяризуемого электродов.

1.4. Адсорбция с переносом заряда.

Адсорбция с переносом заряда. Образование адатомов. Природа «подпотенциального» осаждения (u.p.d.). Совершенно поляризуемый электрод. Электрохимические методы определения истинной площади поверхности электрода.

Раздел 2. Основы массопереноса в электрохимических системах.

2.1. Суммарный поток и его составляющие.

Поток частиц к межфазной границе и его составляющие: диффузия, миграция и конвекция. Дивергенция суммарного потока. Законы Фика. Особенности диффузии к бесконечному плоскому электроду и сферическому микроэлектроду. Точный и приблизительный учет миграции. Теория конвективной диффузии. Вращающийся дисковый электрод.

2.2. Вольтамперометрия обратимых электрохимических систем.

Определение перенапряжения и поляризации, знаки перенапряжения. Стационарные и динамические методы исследования электрохимических систем. Обратимая электрохимическая волна, потенциал полуволны.

2.3. Нестационарная диффузия в электрохимических системах.

Нестационарная диффузия в потенциостатических и гальваностатических условиях. Циклическая вольтамперометрия. Уравнение Рендлса-Шевчика.

2.4. Особенности массопереноса в твердой фазе.

Массоперенос участников электрохимических реакций в твердой фазе. Интеркаляция и деинтеркаляция. Образование поверхностных сплавов.

Раздел 3. Основы электрохимической кинетики и методы исследования электрохимических реакций

3.1. Кинетика элементарного акта переноса электрона.

Перенос электрона в конденсированной среде. Внешне- и внутрисферный перенос электрона. Соотношения Маркуса. Уравнения Фрумкина, Батлера-Фольмера, Тафеля. Современные квантовохимические представления о природе элементарного электрохимического акта.

3.2. Кинетика сложных электрохимических реакций.

Электрохимические реакции с последовательным переносом электронов. Порядки электрохимических реакций. Истинные и кажущиеся коэффициенты переноса. Методы исследования кинетики сложных электрохимических реакций.

3.3. Электрохимическая коррозия и защита от коррозии.

Представление об электрохимической коррозии как о сопряженной электрохимической реакции. Потенциал свободной коррозии. Ток коррозии и методы его определения. Обзор методов защиты от коррозии.

Раздел 4. Основы электрохимических нанотехнологий

4.1. Процессы и методы в электрохимических технологиях.

Процессы, использующиеся в электрохимических технологиях осаждение металлов, оксидов, проводящих полимеров. Локальные и нелокальные электрохимические технологии.

4.2. Электрокатализ.

Основные механизмы электрокатализ. Электрокатализ реакций, происходящих в низкотемпературном топливном элементе (электрохимическом генераторе).

4.3. Литий-ионный и литий-кислородный источники тока.

Природа токообразующих реакций в литий-ионном источнике тока. Материалы электродов. Интеркаляция. Литий-кислородный источник тока.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:	Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	
	Знать:					
1	– современные представления о строении заряженных границ металл-раствор и полупроводник-раствор	+	+			
2	– современные представления о кинетике электрохимических реакций с участием твердых веществ		+	+	+	
	Уметь:					
3	– выбрать адекватный метод исследования и рассчитать характерные параметры электрохимических реакций	+	+			
	– провести выбор электрохимических нанотехнологий для получения гибридных материалов			+	+	
	Владеть:					
5	– современными экспериментальными и расчетными методами в области электрохимического материаловедения	+	+	+	+	
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Общепрофессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>						
	Код и наименование ОПК	Код и наименование индикатора достижения ОПК				
6	ОПК-1 Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	+	+	+	+

7	ОПК-2 Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием	ОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности ОПК-2.2. Проводит синтез веществ и материалов разной природы с использованием имеющихся методик ОПК-2.3. Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Электрохимические системы. Два типа электрохимических систем: гальванический элемент и электролизер. Ток заряжения и фарадеевский ток. Количественные расчеты с использованием закона Фарадея. Решение задач.	4
2	1	Скачки потенциалов на межфазных границах. Электродный потенциал. Уравнение Нернста. Электроды 1,2 и 3 рода, окислительно-восстановительные электроды. Решение задач.	4
3	1	Двойной электрический слой. Уравнение электрокапиллярности. Потенциалы нулевого заряда. Модельные представления о строении ДЭС. Решение задач на нахождение ψ_0 -потенциала методами Грэма-Парсонса и Гурвица-Парсонса.	4
4	1	Адсорбция с переносом заряда. Эффективная валентность электросорбции. Потенциалы полного и свободного нулевого заряда. Кривая заряжения и циклическая вольтамперограмма Pt/Pt и Pt/C-электродов в 0,5 М H_2SO_4 . Нахождение электрохимически активной (EASA) площади поверхности платинового электрода. Особенности определения EASA палладиевого электрода. Решение задач.	4
5	2	Суммарный поток и его составляющие. Диффузия, миграция и конвекция. Уравнение Нернста-Эйнштейна. Вращающийся дисковый электрод. Уравнения Левича и Коутецкого-Левича. Вольтамперные кривые для обратимого окислительно-восстановительного электрода. Циклическая вольтамерометрия обратимого окислительно-восстановительного электрода. Уравнение Рэндлса-Шевчика. Решение задач.	4
6	2	Нестационарная диффузия к плоскому и сферическому электродам. Уравнения Коттрелла. Хронопотенциометрия. Уравнение Сэнда-Караогланова. Решение задач. Особенности массопереноса в твердой фазе.	4
7	3	Основные закономерности переноса электрона в электрохимических реакциях. Электронные термы. Соотношения Бренстеда-Поляни-Семенова. Уравнение Фрумкина. Уравнение Батлера-Фольмера. Уравнение Тафеля. Ток обмена, экспериментальное определение параметров электрохимической реакции. Решение задач.	4

8	3	Кинетика сложных электрохимических реакций. Стехиометрическое число стадий. Электрохимические реакции с последовательным переносом электронов. Порядки электрохимической реакции. Истинный и кажущийся коэффициенты переноса. Решение задач.	4
9	3	Кинетика реакций электрохимического выделения/ионизации водорода и электровосстановления кислорода. Электрохимическое окисление НСО-соединений. Модель параллельных реакций. Решение задач.	4
10	3	Сопряженные электрохимические реакции. Электрохимическая коррозия. Плотность тока и потенциал свободной коррозии. Методы защиты от коррозии. Решение задач.	4
11	4	Экспериментальные методы создания наносистем для электрохимических приложений. Полиольный синтез, высокотемпературное восстановление прекурсоров. Электроосаждение металлов, оксидов и проводящих полимеров. Метод гальванического вытеснения. Каталитические системы со структурой core-shell.	4
12	4	Электроосаждение металлов. Механизмы электрокристаллизации (Фольмера-Вебера, Франка-ван-дер-Мервэ, Странского-Крастанова). Мгновенная и прогрессирующая нуклеация. Интерпретация экспериментальных потенциостатических транзиентов тока.	4
13	4	Методы охарактеризовывания наноструктур в электрохимии. Электрохимические и неэлектрохимические методы.	4

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторный практикум по дисциплине не предусмотрен.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;
- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче **экзамена** (7 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения,

предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме экзамена (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 2 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы 1 и 2 (7 семестр) составляет 60 баллов.

Разделы 1, 2. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 4 вопроса.

1. Основное уравнение электрокапиллярности для идеально-поляризуемого и совершенно поляризуемого электродов.
2. Определение истинной площади поверхности платинового и палладиевого электродов с использованием адатомов меди.
3. Расчет компонентов заряда на идеально-поляризуемом электроде по данным измерения электрической емкости методом Гурвица-Парсонса.
4. Эквивалентные схемы межфазной границы. Фарадеевский ток и ток заряжения ДЭС.

Оценка заданий:

№ задания	1	2	3	4	Σ
Оценка, балл	10	7	7	6	30

Разделы 3, 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 3 вопроса, по 10 баллов за вопрос.

1. Суммарный поток и его составляющие. Дивергенция суммарного потока.
2. Уравнение Баттлера-Фольмера и его предельные случаи. Расчет плотности тока обмена электрохимической реакции.
3. Кинетика электроокисления метанола. Бифункциональный механизм электрокатализа

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (7 семестр – экзамен).

Экзаменационный билет включает контрольные вопросы по разделам 1,2,3 и 4 рабочей программы дисциплины и содержит 2 вопроса. 1 вопрос – 20 баллов, вопрос 2 – 20 баллов.

4. Предмет электрохимии. Типы электрохимических систем (гальванический элемент и электролизер). Определение катода и анода. Ток, протекающий через межфазную границу: фарадеевский ток и ток заряжения двойного электрического слоя. Закон Фарадея.
5. Поверхностный, внутренний и внешний потенциалы. Гальвани- и вольта- потенциал. Проблема абсолютного скачка потенциала (проблема Вольта). Электродный потенциал. Уравнение Нернста.
6. Строение заряженной межфазной границы по Грему. Расчет компонентов поверхностного заряда и скачков потенциала в двойном электрическом слое. Понятие идеально-поляризуемого и неполяризуемого электродов.
7. Адсорбция с переносом заряда. Образование адатомов. Природа «подпотенциального» осаждения (u.p.d.). Совершенно поляризуемый электрод. Электрохимические методы определения истинной площади поверхности электрода.
8. Поток частиц к межфазной границе и его составляющие: диффузия, миграция и конвекция. Дивергенция суммарного потока. Законы Фика. Особенности диффузии к бесконечному плоскому электроду и сферическому микроэлектроду. Точный и приближительный учет миграции. Теория конвективной диффузии. Вращающийся дисковый электрод.
9. Определение перенапряжения и поляризации, знаки перенапряжения. Стационарные и динамические методы исследования электрохимических систем. Обратимая электрохимическая волна, потенциал полуволны.
10. Нестационарная диффузия в потенциостатических и гальваностатических условиях. Циклическая вольтамперометрия. Уравнение Рендлса-Шевчика.
11. Массоперенос участников электрохимических реакций в твердой фазе. Интеркаляция и деинтеркаляция. Образование поверхностных сплавов.
12. Перенос электрона в конденсированной среде. Внешне- и внутрисферный перенос электрона. Соотношения Маркуса. Уравнения Фрумкина, Батлера-Фольмера, Тафеля. Современные квантовохимические представления о природе элементарного электрохимического акта.
13. Электрохимические реакции с последовательным переносом электронов. Порядки электрохимических реакций. Истинные и кажущиеся коэффициенты переноса. Методы исследования кинетики сложных электрохимических реакций.
14. Представление об электрохимической коррозии как о сопряженной электрохимической реакции. Потенциал свободной коррозии. Ток коррозии и методы его определения. Обзор методов защиты от коррозии.
15. Процессы, используемые в электрохимических технологиях осаждение металлов, оксидов, проводящих полимеров. Локальные и нелокальные электрохимические технологии.
16. Электрокатализ. Основные механизмы электрокатализ. Электрокатализ реакций, происходящих в низкотемпературном топливном элементе (электрохимическом генераторе).
17. Природа токообразующих реакций в литий-ионном источнике тока. Материалы электродов. Интеркаляция. Литий-кислородный источник тока.

Фонд оценочных средств приведен в виде отдельного документа, являющегося неотъемлемой частью основной образовательной программы.

8.4. Структура и примеры билетов для экзамена (7 семестр).

Экзамен по дисциплине «**Электрохимическое материаловедение**» проводится в 7 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1,2,3 и 4 рабочей программы дисциплины. Билет для **экзамена** состоит из 2 вопросов, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **экзамена**:

«Утверждаю» _____ (Должность, наименование кафедры) _____ (Подпись) _____ (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__ г.	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха
	04.03.01 Химия
	Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии»
	Электрохимическое материаловедение
Билет № 1 1. Совершенно-поляризуемый электрод. Кривые зарядения и циклические вольтамперограммы Pt/Pt-электрода в растворах серной кислоты. 2. Квантово-химические представления о переносе электрона в конденсированных средах. Соотношения Бренстеда-Поляни-Семенова.	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

А. Основная литература

1. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г.А. Электрохимия. С-Пб.: Лань. Изд 3-е, испр. 2015. 672 с.
2. Андреев Ю.Я. Электрохимия металлов и сплавов. М.: МИСИС. 2016. 326 с.
3. В. Плит. Электрохимия в материаловедении. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2015. 446 с.

Б. Дополнительная литература

1. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А. Введение в электрохимическую кинетику. М.: Высшая школа. 1983. 400 с.
2. Фрумкин А.Н. Потенциалы нулевого заряда. М.: Наука. 1979.
3. Багоцкий В.С. Основы электрохимии. М.: Химия. 1988. 400 с.
4. Лукомский Ю.Я., Гамбург Ю.Д. Физико-химические основы электрохимии. Долгопрудный. Изд-во Интеллект. 2008. 424 с.
5. Кришталек Л.И. Электродные реакции. Механизм элементарного акта. М.: Наука 1979. 224 с.

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

- Реферативный журнал «Химия» (РЖХ) ISSN 0869-5873;

Политематические базы данных (БД):

- США: CAPLUS; COMPENDEX;
- Великобритания: INSPEC;
- Франция: PASCAL.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации учебной программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций ;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:

- сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине *«Электрохимическое материаловедение»* проводятся в форме аудиторных занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Аудитория с доской, компьютером, проектором и экраном.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проектор; экран; аудитория со стационарным комплексом отображения информации с электронного носителя; сканер; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Строение заряженных межфазных границ	<i>Знает:</i> – современные представления о строении заряженных границ металл-раствор и полупроводник-раствор <i>Умеет:</i> – выбрать адекватный метод исследования и рассчитать характерные параметры электрохимических реакций <i>Владеет:</i> – современными экспериментальными и расчетными методами в области электрохимического материаловедения.	Оценка за контрольную работу №1 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)
Раздел 2. Основы массопереноса в электрохимических системах.	<i>Знает:</i> – современные представления о строении заряженных границ металл-раствор и полупроводник-раствор – современные представления кинетике электрохимических реакций с участием твердых веществ. <i>Умеет:</i> – выбрать адекватный метод исследования и рассчитать характерные параметры электрохимических реакций <i>Владеет:</i> – современными экспериментальными и расчетными методами в области электрохимического материаловедения.	Оценка за контрольную работу №1 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)
Раздел 3. Основы электрохимической кинетики и методы исследования электрохимических реакций	<i>Знает:</i> – современные представления о кинетике электрохимических реакций с участием твердых веществ. <i>Умеет:</i> – провести выбор электрохимических нанотехнологий для получения гибридных материалов <i>Владеет:</i> – современными	Оценка за контрольную работу №2 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)

	экспериментальными и расчетными методами в области электрохимического материаловедения.	
Раздел 4. Основы электрохимических нанотехнологий	<i>Знает:</i> – современные представления кинетике электрохимических реакций с участием твердых веществ. <i>Умеет:</i> – провести выбор электрохимических нанотехнологий для получения гибридных материалов <i>Владеет:</i> – современными экспериментальными и расчетными методами в области электрохимического материаловедения.	Оценка за контрольную работу №2 (7 семестр) Оценка за экзамен (7 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»

наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева»**

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по образованию

_____ А. М. Макуренков

«_____» _____ 2024 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«DFT-методы»**

Направление подготовки 04.03.01 Химия

**Профиль подготовки – «Материалы для генерации, преобразования и
хранения энергии»**

Квалификация «бакалавр»

РАССМОТРЕНО И ОДОБРЕНО
на заседании Методической комиссии
РХТУ им. Д.И. Менделеева
«_____» _____ 2024 г.

Председатель _____ Н.А. Макаров

Москва 2024

Программа составлена доцентом Сколковского института науки и технологий Левченко С.В.

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры Сколтеха РХТУ им. Д.И. Менделеева
«26» августа 2024 г., протокол № 12

1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования – бакалавриат по направлению подготовки **04.03.01 Химия** (ФГОС ВО), рекомендациями Методической комиссии и накопленным опытом преподавания дисциплины кафедрой **Сколтеха «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии»** РХТУ им. Д.И. Менделеева. Программа рассчитана на изучение дисциплины в течение одного семестра.

Дисциплина **«DFT-методы»** относится к части дисциплин учебного плана, формируемой участниками образовательных отношений. Программа дисциплины предполагает, что обучающиеся имеют теоретическую и практическую подготовку в области общей физики, квантовой химии.

Цель дисциплины – обобщение, закрепление и совершенствование знаний, умений и владений, обеспечивающих способность и готовность бакалавра в полной мере осуществлять научно-исследовательскую работу в области компьютерного моделирования материалов

Задачи дисциплины

- ознакомление с современными методами компьютерного моделирования материалов
- ознакомление и овладение навыками использования программ для компьютерного моделирования материалов

Дисциплина **«DFT-методы»** преподается в 6 семестре. Контроль успеваемости студентов ведется по принятой в университете рейтинговой системе.

Рабочая программа дисциплины может быть реализована с применением электронных образовательных технологий и электронного обучения полностью или частично.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Изучение дисциплины направлено на приобретение следующих **компетенций и индикаторов их достижения:**

Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:

Задача профессиональной деятельности	Объект или область знания	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК	Основание (профессиональный стандарт, анализ опыта) Обобщенные трудовые функции
Научно-исследовательский тип задач профессиональной деятельности				
1. Научно-техническая разработка и методическое сопровождение в области создания наноструктурированных композиционных материалов 2. Сбор и систематизация научно-технической информации о существующих наноструктурированных композиционных материалах	Материаловедение и технология новых материалов	ПК-7. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических и гибридных соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-7.1. Знает современные методы, использующиеся при проектировании направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи	<i>Профессиональный стандарт Специалист по разработке наноструктурированных композиционных материалов (утв. приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 8 сентября 2015 г. N 604н)</i> (уровень квалификации – 6) Выполнение работ по поиску экономических и эффективных методов производства наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами
			ПК-7.2. Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения направленного синтеза органических и гибридных соединений по заданию специалиста более высокой квалификации	
			ПК-7.3. Владеет приёмами обработки, анализа, интерпретации результатов эксперимента по проведению направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданными свойствами	

В результате изучения дисциплины студент бакалавриата должен:

Знать:

- возможности и проблемы компьютерного моделирования функциональных материалов
- особенности электронной структуры кристаллов
- основы теории функционала плотности (ТФП)
- различные программные релизации ТФП

Уметь:

- использовать методы теории функционала плотности для моделирования материалов
- пользоваться специализированными компьютерными программами для расчета атомной и электронной структуры материалов

Владеть:

- современными методами моделирования материалов, поверхностей, дефектов

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Объем дисциплины		
	ЗЕ	Акад. ч.	Астр. ч.
Общая трудоемкость дисциплины	3	108	81
Контактная работа – аудиторные занятия:	1,8	64	48,6
Лекции	0,9	32	24,3
Практические занятия (ПЗ)	0,9	32	24,3
Лабораторные работы (ЛР)	-	-	-
Самостоятельная работа	1,2	44	33
Контактная самостоятельная работа	1,2	0,4	0,3
Самостоятельное изучение разделов дисциплины		43,6	32,7
Вид контроля:			
Экзамен	-	-	-
Контактная работа – промежуточная аттестация	-	-	-
Подготовка к экзамену.		-	-
Вид итогового контроля:	зачёт с оценкой		

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Академ. часов				
		Всего	Лек- ции	Прак. зан.	Лаб. рабо- ты	Сам. рабо- та
1.	Раздел 1. Электронная структура кристаллов	<i>Разр.</i>	6	6		9
1.1	Зонная структура кристаллов и ее связь с молекулярными орбиталями. Основные типы кристаллических решеток.	<i>Разр.</i>	2	2		3
1.2	Состояния Блоха, обратное пространство, к-точки, зоны Бриллюэна. Плотность состояний, проекция на атомные орбитали.	<i>Разр.</i>	2	2		3
1.3	Металлы, полупроводники, изоляторы. Энергия Ферми.	<i>Разр.</i>	2	2		3
2.	Раздел 2. Уравнение Шрёдингера для много-электронных систем	<i>Разр.</i>	4	4		6
2.1	Уравнение Шрёдингера для многих электронов, принцип Паули, детерминант Слейтера, вариационный принцип, кулоновское и обменное взаимодействия, электронная корреляция.	<i>Разр.</i>	2	2		3
2.2	Численное решение много-электронного уравнения Шрёдингера, базисные наборы, периодические граничные условия, цикл самосогласованности	<i>Разр.</i>	2	2		3
3.	Раздел 3. Теория функционала плотности	<i>Разр.</i>	10	10		13
3.1	Теоремы Хоэнберга-Кона	<i>Разр.</i>	2	2		3
3.2	Приближение локальной плотности, обобщенное градиентное приближение (GGA), мета-GGA	<i>Разр.</i>	2	2		2,5
3.3	Уравнения Кона-Шэма, численное решение уравнений ТФП	<i>Разр.</i>	2	2		2,5
3.4	Проблема самовзаимодействия, теорема Янака, теорема энергии ионизации, гибридные функционалы, поправки Хаббарда		4	4		5
4.	Раздел 4. Моделирование реальных материалов	<i>Разр.</i>	8	8		11
4.1	Перво-принципная атомистическая термодинамика, поверхности, дефекты	<i>Разр.</i>	2	2		3
4.2	Молекулярная динамика, метод кинетического Монте Карло	<i>Разр.</i>	2	2		3

4.3	Аналитика данных, машинное обучение	Разр.	4	4		5
5.	Раздел 5. За пределами ТФП		4	4		5
5.1	Краткий обзор методов много-частичной теории возмущений, диффузионного и вариационного Монте Карло		4	4		5
	ИТОГО	УП	32	32	-	44

4.2 Содержание разделов дисциплины

Раздел 1. Электронная структура кристаллов

Трансляционная симметрия, периодические граничные условия. Решетка Бравэ. Зонная структура кристаллов и ее связь с молекулярными орбиталями. Основные типы кристаллических решеток. Теорема Блоха, состояния Блоха, обратное пространство, к-точки, зоны Бриллюэна, физический смысл к-точек. Расчеты зонной структуры, зона проводимости, валентная зона. Плотность состояний, проекция на атомные орбитали. Металлы, полупроводники, изоляторы. Энергия Ферми, поверхность Ферми. Сетка к-точек, сетка Монкхорст-Пака, учет симметрии кристалла при выборе сетки к-точек.

Раздел 2. Уравнение Шрёдингера для много-электронных систем

Нерелятивистское уравнение Шрёдингера для многих электронов, разделение переменных, стационарное уравнение Шрёдингера. Приближение Борна-Оппенгеймера (адиабатическое), пределы применимости этого приближения. Уравнения для электронов и ядер в приближении Борна-Оппенгеймера. Многоэлектронные и одноэлектронные состояния, учет спина. Приближение Хартри. Принцип Паули, детерминант Слейтера, вариационный принцип, кулоновское и обменное взаимодействия. Уравнения Хартри-Фока. Электронная корреляция. Статическая и динамическая корреляция, условия, при которых корреляционные эффекты сильны. Численное решение много-электронного уравнения Шрёдингера. Базисные наборы, периодические граничные условия, локализованные и делокализованные базисные функции, псевдопотенциалы. Цикл самосогласованности, параметры сходимости, смешивание плотностей, метод Пулая, метод предобуславливания Керкера. Особенности цикла самосогласованности для металлов, уширение распределения электронов вокруг уровня Ферми.

Раздел 3. Теория функционала плотности

Теоремы Хоэнберга-Кона: функциональная связь между энергией системы и электронной плотностью, минимизация энергии по отношению к вариациям плотности. Кинетическая энергия как функционал плотности, модель Томаса-Ферми. Уравнения Кона-Шэма, эффективный потенциал. Модель свободного электронного газа, обменное и корреляционное взаимодействия в электронном газе. Приближение локальной плотности. Обобщенное градиентное приближение (GGA). Условия, которым удовлетворяет точный функционал плотности. Плотность кинетической энергии, мета-GGA. Численное решение уравнений ТФП, цикл самосогласованности в численном решении уравнений ТФП. Проблема самовзаимодействия электронов, эффекты самовзаимодействия на локализацию электронов в молекулах и кристаллах, различия между ними. Теория ансамбля многоэлектронных состояний, дробные числа электронов (занятости орбиталей). Теорема Янака. Свойства точного функционала плотности, теорема энергии ионизации. Ширина запрещенной зоны, отличие ширины запрещенной зоны Кона-Шэма от фундаментальной ширины. Обобщенная теория функционала плотности, гибридные функционалы. Поправки самосогласованности, поправки Хаббарда.

Раздел 4. Моделирование реальных материалов

Статистические эффекты при конечных температурах и давлениях. Энтропия. Термодинамические потенциалы. Статистическая сумма. Перво-принципная атомистическая термодинамика, химический потенциал. Молекулярные степени свободы, расчеты химического потенциала молекул и атомов в газовой фазе. Моделирование поверхности, модель поверхностного слоя, вакуумный слой, насыщение свободных связей в моделях поверхности. Поверхностные состояния, зонная структура поверхности. Поверхностный слой с ненулевым дипольным моментом, дипольная поправка, работа выхода. Свободная энергия поверхности, поверхностные фазовые диаграммы. Конфигурационная энтропия. Точечные дефекты: типы, энергия образования, взаимодействие, концентрация при реалистичных температурах и давлениях. Особенности моделирования заряженных дефектов, учет артефактов периодических граничных условий при моделировании заряженных дефектов. Образование зарядового слоя и изгиб электронных зон при образовании дефектов на поверхности полупроводников. Молекулярная динамика, статистическая выборка с использованием молекулярной динамики, термодинамическое интегрирование, метадинамика, моделирование химических реакций. Молекулярная динамика с параллельным отпуском, вычисление свободной энергии. Моделирование ансамблей химических реакций, гетерогенный катализ, метод кинетического Монте Карло. Машинное обучение, межатомные потенциалы, полученные методом машинного обучения. Дескрипторы. Высокопроизводительный поиск функциональных материалов с улучшенными свойствами. Модели структура-свойство. Поиск дескрипторов на основе данных. Обнаружение статистически значимых подгрупп данных. Предсказание кристаллической структуры материалов и каталитической активности с использованием дескрипторов.

Раздел 5. За пределами ТФП

Теория возмущений Рэля-Шрёдингера. Методы на основе многочастичной волновой функции. Теория Мёллера-Плессета. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод связанных кластеров. Методы диффузионного и вариационного Монте Карло. Метод случайных фаз. Метод GW.

5. СООТВЕТСТВИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	В результате освоения дисциплины студент должен:		Раздел 1	Раздел 2	Раздел 3	Раздел 4	Раздел 5
	Знать:						
1	– возможности и проблемы компьютерного моделирования функциональных материалов		+				
2	– особенности электронной структуры кристаллов		+				
	– основы теории функционала плотности (ТФП)			+	+		
	– различные программные релизации ТФП					+	+
	Уметь:						
3	– использовать методы теории функционала плотности для моделирования материалов		+	+			
4	– пользоваться специализированными компьютерными программами для расчета атомной и электронной структуры материалов				+	+	+
	Владеть:						
5	– современными методами моделирования материалов, поверхностей, дефектов		+	+	+	+	+
В результате освоения дисциплины студент должен приобрести следующие <u>Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения:</u>							
	Код и наименование ПК	Код и наименование индикатора достижения ПК					
11 12	ПК-7. Способен использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических и гибридных соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-7.1. Знает современные методы, использующиеся при проектировании направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданным набором свойств в рамках поставленной задачи	+	+	+	+	+
		ПК-7.2. Умеет применять полученные знания для системного и комплексного проведения направленного синтеза органических и гибридных соединений по заданию специалиста более высокой квалификации	+	+	+	+	+
		ПК-7.3. Владеет приёмами обработки, анализа, интерпретации результатов эксперимента по проведению направленного синтеза органических и гибридных соединений с заданными свойствами	+	+	+	+	+

6. ПРАКТИЧЕСКИЕ И ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

6.1. Практические занятия

Примерные темы практических занятий по дисциплине.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Темы практических занятий	Часы
1	1	Зонная структура кристаллов и ее связь с молекулярными орбиталями. Основные типы кристаллических решеток.	2
2	1	Состояния Блоха, обратное пространство, к-точки, зоны Бриллюэна. Плотность состояний, проекция на атомные орбитали.	2
3	1	Металлы, полупроводники, изоляторы. Энергия Ферми.	2
4	2	Уравнение Шрёдингера для многих электронов, принцип Паули, детерминант Слейтера, вариационный принцип, кулоновское и обменное взаимодействия, электронная корреляция.	2
5	2	Численное решение много-электронного уравнения Шрёдингера, базисные наборы, периодические граничные условия, цикл самосогласованности	2
6	3	Теоремы Хоэнберга-Кона	2
7	3	Приближение локальной плотности, обобщенное градиентное приближение (GGA), мета-GGA	2
8	3	Уравнения Кона-Шэма, численное решение уравнений ТФП	2
9	3	Проблема самовзаимодействия, теорема Янака, теорема энергии ионизации, гибридные функционалы, поправки Хаббарда	4
10	4	Перво-принципная атомистическая термодинамика, поверхности, дефекты	2
11	4	Молекулярная динамика, метод кинетического Монте Карло	2
12	4	Аналитика данных, машинное обучение	4
13	5	Краткий обзор методов много-частичной теории возмущений, диффузионного и вариационного Монте Карло	4

6.2 Лабораторные занятия

Лабораторные занятия по дисциплине «*DFT-методы*» не предусмотрены.

7. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- ознакомление и проработку рекомендованной литературы, работу с электронно-библиотечными системами, включая переводы публикаций из научных журналов, цитируемых в базах Scopus, Web of Science, Chemical Abstracts, РИНЦ;
- посещение отраслевых выставок и семинаров;

- участие в семинарах РХТУ им. И. Менделеева по тематике дисциплины;
- подготовку к выполнению контрольных работ по материалу лекционного курса;
- подготовку к сдаче *зачёта с оценкой* (6 семестр) по дисциплине.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь период изучения, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе. При работе с указанными источниками рекомендуется составлять краткий конспект материала, с обязательным фиксированием библиографических данных источника.

8. ПРИМЕРЫ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Совокупная оценка по дисциплине складывается из оценок за выполнение контрольных работ (максимальная оценка 60 баллов) и итогового контроля в форме *Зачёта с оценкой* (максимальная оценка 40 баллов).

8.1. Примерная тематика реферативно-аналитической работы.

Реферативно-аналитическая работа по дисциплине не предусмотрена.

8.2. Примеры контрольных вопросов для текущего контроля освоения дисциплины

Для текущего контроля предусмотрено 3 контрольных работы. Максимальная оценка за контрольные работы составляет 20 баллов за каждую.

Раздел 1-2. Примеры вопросов к контрольной работе № 1. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1. Какова обратная решетка для кубической объемно-центрированной решетки?
2. Каков физический смысл к-точек в состояниях Блоха?
3. Какова размерность плотности состояний?
4. Какие свойства атомных орбиталей определяют дисперсию электронных зон, построенных из этих орбиталей?
5. Сколько зон Бриллюэна нужно рассмотреть, чтобы полностью описать электронную структуру кристалла?
6. Какую форму может в принципе иметь элементарная ячейка кристалла?
7. Может ли волновая функция иметь пространственную периодичность, отличную от периодичности элементарной ячейки?
8. Какова минимальная вырожденность состояний кристалла в отсутствие магнитного поля и почему?
9. Опишите типы электронных корреляций и укажите приближения в методе Хартри-Фока, с которыми они связаны.
10. Нарисуйте общую блок-схему решения уравнения Шрёдингера методом самосогласованного поля в приближении Хартри-Фока.

Раздел 3. Примеры вопросов к контрольной работе № 2. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1. Доказать первую теорему Хоэнберга-Кона.
2. Доказать вторую теорему Хоэнберга-Кона.
3. Описать идею локального и обобщенного градиентного приближений плотности.
4. Какой физический смысл имеет дробное значение числа электронов?

5. Вывести зависимость полной энергии системы от числа электронов между двумя последовательными целочисленными значениями.
6. Доказать теорему Янака.
7. Присутствует ли самовзаимодействие электронов в приближении Хартри-Фока?
8. В какую сторону (большую или меньшую) отличается ширина запрещенной зоны, рассчитанная методом Хартри-Фока, от экспериментальных значений?
9. Включает ли метод локального приближения плотности (LDA) обменное взаимодействие?
10. Присутствует ли самовзаимодействие в обобщенном градиентном приближении (GGA)?

Раздел 4. Примеры вопросов к контрольной работе № 3. Контрольная работа содержит 10 вопросов, по 2 балла за вопрос.

1. Какой термодинамический потенциал стремится к минимуму при постоянных температуре и давлении?
2. Дайте определение химического потенциала.
3. Как связаны энтропия и число микросостояний в статистической термодинамике?
4. Вывести формулу числа микросостояний для заданного макросостояния.
5. Напишите выражение свободной энергии Гиббса через статистическую сумму.
6. Каково соотношение между химическими потенциалами на поверхности, в твердой и газообразной фазах в термодинамическом равновесии?
7. Нарисуйте график зависимости химического потенциала атома азота от температуры в атмосфере с парциальным давлением азота 0.7 атм, используя таблицы NIST-JANAF.
8. Построить фазовую диаграмму поверхности без учета вклада колебаний и конфигурационной энтропии, используя данные атомные структуры и их энергии.
9. Какому физическому состоянию поверхности в атмосфере кислорода соответствует значение химического потенциала атома кислорода, равное половине полной энергии молекулы кислорода?
10. Перечислите статистические ансамбли, которые можно моделировать с помощью молекулярной динамики.

8.3. Вопросы для итогового контроля освоения дисциплины (6 семестр – зачёт с оценкой).

Билет включает контрольные вопросы по разделам 1-5 рабочей программы дисциплины и содержит 3 вопроса и задачу, 1 вопрос – 6 баллов, вопрос 2 – 6 баллов, вопрос 3 – 8 баллов, задача- 20 баллов.

1. Какова обратная решетка для кубической объемно-центрированной решетки?
2. Каков физический смысл k-точек в состояниях Блоха?
3. Какова размерность плотности состояний?
4. Какие свойства атомных орбиталей определяют дисперсию электронных зон, построенных из этих орбиталей?
5. Сколько зон Бриллюэна нужно рассмотреть, чтобы полностью описать электронную структуру кристалла?
6. Какую форму может в принципе иметь элементарная ячейка кристалла?
7. Может ли волновая функция иметь пространственную периодичность, отличную от периодичности элементарной ячейки?
8. Какова минимальная вырожденность состояний кристалла в отсутствие магнитного поля и почему?
9. Опишите типы электронных корреляций и укажите приближения в методе Хартри-Фока, с которыми они связаны.

10. Нарисуйте общую блок-схему решения уравнения Шрёдингера методом самосогласованного поля в приближении Хартри-Фока.
11. Перечислите наиболее распространенные базисные функции для описания электронной структуры материалов.
12. Доказать первую теорему Хоэнберга-Кона.
13. Доказать вторую теорему Хоэнберга-Кона.
14. Описать идею локального и обобщенного градиентного приближений плотности.
15. Какой физический смысл имеет дробное значение числа электронов?
16. Вывести зависимость полной энергии системы от числа электронов между двумя последовательными целочисленными значениями.
17. Доказать теорему Янака.
18. Присутствует ли самовзаимодействие электронов в приближении Хартри-Фока?
19. В какую сторону (большую или меньшую) отличается ширина запрещенной зоны, рассчитанная методом Хартри-Фока, от экспериментальных значений?
20. Включает ли метод локального приближения плотности (LDA) обменное взаимодействие?
21. Присутствует ли самовзаимодействие в обобщенном градиентном приближении (GGA)?
22. Как зависит энергия высшего занятого состояния Кона-Шэма от его занятости?
23. Какой термодинамический потенциал стремится к минимуму при постоянных температуре и давлении?
24. Дайте определение химического потенциала.
25. Как связаны энтропия и число микросостояний в статистической термодинамике?
26. Вывести формулу числа микросостояний для заданного макросостояния.
27. Напишите выражение свободной энергии Гибса через статистическую сумму.
28. Каково соотношение между химическими потенциалами на поверхности, в твердой и газообразной фазах в термодинамическом равновесии?
29. Нарисуйте график зависимости химического потенциала атома азота от температуры в атмосфере с парциальным давлением азота 0.7 атм, используя таблицы NIST-JANAF.
30. Построить фазовую диаграмму поверхности без учета вклада колебаний и конфигурационной энтропии, используя данные атомные структуры и их энергии.
31. Какому физическому состоянию поверхности в атмосфере кислорода соответствует значение химического потенциала атома кислорода, равное половине полной энергии молекулы кислорода?
32. Перечислите статистические ансамбли, которые можно моделировать с помощью молекулярной динамики.
33. Опишите алгоритм термодинамического интегрирования.
34. Какова общая идея термостата Нозе-Гувера?

8.4. Структура и примеры билетов для зачёта с оценкой (6 семестр).

Зачёт с оценкой по дисциплине «**DFT-методы**» проводится в 6 семестре и включает контрольные вопросы по разделам 1-5 рабочей программы дисциплины. Билет для **зачёта с оценкой** состоит из 3 вопросов и задачи, относящихся к указанным разделам.

Пример билета для **зачёта с оценкой**:

«Утверждаю» Зав.кафедрой Сколтеха (Должность, наименование кафедры) _____ /Травень В.Ф./	Министерство науки и высшего образования РФ
	Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева
	Кафедра Сколтеха

(Подпись) (И. О. Фамилия) «__» _____ 20__	04.03.01 Химия Профиль – «Материалы для генерации, преобразования и хранения энергии» DFT-методы
Билет № 1 1. Доказать вторую теорему Хойнберга-Кона. 2. Описать идею локального и обобщенного градиентного приближения плотности. 3. Какой физический смысл имеет дробное значение числа электронов? Задача: Выведите зависимость полной энергии системы $E_{\text{tot}}(N)$ между двумя целыми числами	

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Рекомендуемая литература

1. Сатанин, А. М. Введение в теорию функционала плотности : учебно-методическое пособие / А. М. Сатанин. — Нижний Новгород : ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2009
2. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела, М.: Наука, 1978.
3. Киттель, Ч. Квантовая теория твёрдых тел: пер. с англ. / Ч. Киттель. - М. : Наука, 1967.
4. Барановский В.И., Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие, Издательство "Лань" (2019)
5. В.П. Смирнов КУРС СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ: Конспект лекций, Санкт-Петербург 2010.
6. Мамонова М.В., Прудников В.В., Прудникова И.А. Физика поверхности. Теоретические модели и экспериментальные методы, ISBN: 978-5-9221-1236-9, ФИЗМАТЛИТ 2011(https://www.rfbr.ru/rffi/ru/books/o_491700)
7. Полак, Л. С. Вычислительные методы в химической кинетике [Текст] / Л. С. Полак, М. Я. Гольденберг, А. А. Левицкий ; ред. Ю. Н. Туманов ; АН СССР. Институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева. - М. : Наука, 1984

Б. Дополнительная литература

1. Киттель, Ч. Статистическая термодинамика [Текст] : пер. с англ. / Ч. Киттель. - М. : Наука, 1977
2. Цюлике, Л., Квантовая химия : [Учебное пособие] : Пер. с нем. / Л. Цюлике. - М. : Мир. Т.1 : Основы и общие методы. - 1976.
3. С.В. Колесников, А.М. Салецкий, С.А. Докукин, А.Л. Клавсюк, КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО: МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ К ФИЗИКЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2018 год, том 30, номер 2, стр. 48

9.2. Рекомендуемые источники научно-технической информации

- Раздаточный иллюстративный материал к лекциям.
- Презентации к лекциям.

Научно-технические журналы:

- Реферативный журнал «Химия» (РЖХ) ISSN 0869-5873;

Политематические базы данных (БД):

- США: CAPLUS; COMPENDEX;
- Великобритания: INSPEC;
- Франция: PASCAL.

9.3. Средства обеспечения освоения дисциплины

Для реализации рабочей программы подготовлены следующие средства обеспечения освоения дисциплины:

- компьютерные презентации лекций;
- задания для текущего контроля освоения дисциплины
- задания для итогового контроля освоения дисциплины.

При переходе на ЭО и ДОТ:
сочетание технологий (ЕИОС; работа по E-mail, Zoom- конференция).

10. ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОБРАЗОВАТЕЛЬНОМ ПРОЦЕССЕ

Информационную поддержку изучения дисциплины осуществляет Информационно-библиотечный центр (ИБЦ) РХТУ им. Д.И. Менделеева, который обеспечивает обучающихся основной учебной, учебно-методической и научной литературой, необходимой для организации образовательного процесса по дисциплине. Общий объем многоотраслевого фонда ИБЦ на 01.01.2021 составляет 1 716 243 экз.

Фонд ИБЦ располагает учебной, учебно-методической и научно-технической литературой в форме печатных и электронных изданий, а также включает официальные, справочно-библиографические, специализированные отечественные и зарубежные периодические и информационные издания. ИБЦ обеспечивает доступ к профессиональным базам данных, информационным, справочным и поисковым системам.

Каждый обучающийся обеспечен свободным доступом из любой точки, в которой имеется доступ к сети Интернет и к электронно-библиотечной системе (ЭБС) Университета, которая содержит различные издания по основным изучаемым дисциплинам и сформирована по согласованию с правообладателями учебной и учебно-методической литературы.

Для более полного и оперативного справочно-библиографического и информационного обслуживания в ИБЦ реализована технология Электронной доставки документов.

Полный перечень электронных информационных ресурсов, используемых в процессе обучения, представлен в основной образовательной программе.

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

В соответствии с учебным планом занятия по дисциплине «*DFT-методы*» проводятся в форме лекционных и семинарских занятий и самостоятельной работы обучающегося.

11.1. Оборудование, необходимое в образовательном процессе:

Аудитория с доской, компьютером, проектором и экраном.

11.2. Учебно-наглядные пособия:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса.

11.3. Компьютеры, информационно-телекоммуникационные сети, аппаратно-программные и аудиовизуальные средства:

Персональные компьютеры, укомплектованные проигрывателями CD и DVD, принтерами и программными средствами; проектор; экран; аудитория со стационарным комплексом отображения информации с электронного носителя; сканер; локальная сеть с выходом в Интернет.

11.4. Печатные и электронные образовательные и информационные ресурсы:

Информационно-методические материалы: учебные пособия по дисциплине; раздаточный материал к разделам лекционного курса;

Электронные образовательные ресурсы: электронные презентации к разделам лекционного курса; учебно-методические разработки в электронном виде; справочные материалы в печатном и электронном виде.

11.5. Перечень лицензионного программного обеспечения:

Полный перечень лицензионного программного обеспечения представлен в основной образовательной программе.

12. ТРЕБОВАНИЯ К ОЦЕНКЕ КАЧЕСТВА ОСВОЕНИЯ ПРОГРАММЫ

Наименование разделов	Основные показатели оценки	Формы и методы контроля и оценки
Раздел 1. Электронная структура кристаллов	<i>Знает:</i> – возможности и проблемы компьютерного моделирования функциональных материалов – особенности электронной структуры кристаллов <i>Умеет:</i> – использовать методы теории функционала плотности для моделирования материалов <i>Владеет:</i> – современными методами моделирования материалов, поверхностей, дефектов	Оценка за контрольную работу №1 (6 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (6 семестр)
Раздел 2. Уравнение Шрёдингера для много-электронных систем	<i>Знает:</i> – основы теории функционала плотности (ТФП) <i>Умеет:</i> – использовать методы теории функционала плотности для моделирования материалов <i>Владеет:</i> – современными методами моделирования материалов, поверхностей, дефектов	Оценка за контрольную работу №1 (6 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (6 семестр)

Раздел 3. Теория функционала плотности	<i>Знает:</i> – основы теории функционала плотности (ТФП) <i>Умеет:</i> – пользоваться специализированными компьютерными программами для расчета атомной и электронной структуры материалов <i>Владеет:</i> – современными методами моделирования материалов, поверхностей, дефектов	Оценка за контрольную работу №2 (6 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (6 семестр)
Раздел 4. Моделирование реальных материалов	<i>Знает:</i> – различные программные реализации ТФП <i>Умеет:</i> – пользоваться специализированными компьютерными программами для расчета атомной и электронной структуры материалов <i>Владеет:</i> – современными методами моделирования материалов, поверхностей, дефектов	Оценка за контрольную работу №3 (6 семестр) Оценка за <i>зачёт</i> (6 семестр)
Раздел 5. За пределами ТФП	<i>Знает:</i> – различные программные реализации ТФП <i>Умеет:</i> – пользоваться специализированными компьютерными программами для расчета атомной и электронной структуры материалов <i>Владеет:</i> – современными методами моделирования материалов, поверхностей, дефектов	Оценка за <i>зачёт</i> (6 семестр)

13. ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА ДЛЯ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Обучение инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется в соответствии с:

- Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (Приказ Минобрнауки РФ от 05.04.2017 № 301);

- Положением о порядке организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры в РХТУ им. Д.И. Менделеева, принятым решением Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 30.10.2019, протокол № 3, введенным в действие приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.11.2019 № 646А;

- Методическими рекомендациями по организации образовательного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в образовательных организациях высшего образования, в том числе оснащенности образовательного процесса (утверждены заместителем Министра образования и науки РФ А.А. Климовым от 08.04.2014 № АК-44/05вн).

Дополнения и изменения к рабочей программе дисциплины

«_____»

основной образовательной программы

код и наименование направления подготовки (специальности)

«_____»
наименование ООП

Форма обучения: _____

Номер изменения/ дополнения	Содержание дополнения/изменения	Основание внесения изменения/дополнения
1.		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.
		протокол заседания Ученого совета №_____от «____»_____20__г.



РХТУ им. Д.И. Менделеева
ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ПРОСТОЙ
ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

Владелец: Комарницкая Елена Анатольевна
Проректор по образованию,
Ректорат

Подписан: 29:08:2025 11:45:41