

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Должность: врио ректора

Дата подписания: 06.06.2022 16:44:45

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:

Руководитель ООП:

П.М. Пахомов

28 апреля 2021г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Геометрия молекул и кристаллов в числах

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль)

Физическая химия

Для студентов 1, 2 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Русакова Н.П.

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины является: знакомство студента с идеями и методами симметрии, составляющими теоретический фундамент современной химической науки. Задачами дисциплины являются: освоение ее понятийного аппарата, раскрытие основных принципов симметрии, использование модельных симметричных кристаллохимических представлений в решении конкретных проблем химии. Содержание дисциплины «Геометрия молекул и кристаллов в числах» определяется как учением о пространственном строении кристаллов и его влиянии на их свойства (физические, химические, механические), так и одной из самых важных концепций современного естествознания – концепцией *симметрии*. Симметричные представления широко проникают в настоящее время во все уголки химии.

Кристаллы являются самыми распространенными объектами, которые исследует физика твердого тела и кристаллохимия. Внутреннюю структуру кристалла можно установить, исходя из его свойств симметрии, которые определяют основные характерные свойства кристалла. Теория элементарных частиц, кристаллография и кристаллофизика, теория пространства и времени, молекулярная биология, квантовая химия, многочисленные разделы математики испытали на себе благотворное влияние учения о симметрии.

Предмет дисциплины составляет прежде всего пространственное строение кристаллов и молекул и других химических частиц (молекулярных ионов, комплексов, кластеров) и его влияние на различные свойства веществ. Рассматриваются пути применения *теории симметрии* к конкретным вопросам химии, которые сводятся к изучению алгебраическими методами неалгебраических объектов, например, атомов, молекул, твердых тел и т.д. Большое число твердых химических продуктов принадлежит к кристаллам. При этом химические законы проявляются в кристаллических телах зачастую иначе, чем в растворах, газах и расплавах. Поэтому кристаллы, их строение являются предметом традиционного внимания химиков. Симметрия является важнейшим свойством кристаллов, как непрерывных сред, так и атомных структур. Симметрия кристаллов может служить основой для *геометрической классификации* и описания кристаллических атомных структур и кристаллических сред. Конкретный вид симметрии кристалла определяет спектр его физических свойств. Классификация кристаллов, анализ их свойств во многом базируется на различии типов симметрии.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина входит в Элективные дисциплины 5 обязательной части Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина «Геометрия молекул и кристаллов в числах» непосредственно связана со многими дисциплинами реализуемой ООП, она логически и содержательно-методически продолжает часть программ дисциплин, изучаемых в первом семестре, в то же время, ее содержание дает базу и

пересекается в понятийном и терминологическом аппарате с некоторыми дисциплинами второго курса. Так, в рамках курса «Геометрия молекул и кристаллов в числах» предполагается анализ симметричных групп у силикатов, ленточная структура которых повторяет особенности полимерных звеньев, рассматриваемых дисциплиной «Структура и свойства полимеров». В то же время симметрия конформаций, влияющая на структуру и свойства всего кристалла так же рассматривается параллельно в рамках «Конформационного анализа» с позиции устойчивости торсионных изомеров и т.д.

3. Объем дисциплины 7 зачетных единиц, 252 академических часа, в том числе:

контактная аудиторная работа: практические занятия - 45 часов, в т. ч.

практическая подготовка – 45 часов;

самостоятельная работа: 171, контроль – 36 часов.

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
<p>ОПК-1 Способен выполнять комплексные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	<p>ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук; ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.</p>
<p>ОПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p>	<p>ОПК-2.1. Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук; ОПК-2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.</p>

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:

зачёт во 2-м семестре,

экзамен в 3-м семестре.

6. Язык преподавания русский.