

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

«Структурная химия»

Дисциплина «Структурная химия» является частью программы бакалавриата «Биотехнология (общий профиль, СУОС)» по направлению «19.03.01 Биотехнология».

Цели и задачи дисциплины

Цель учебной дисциплины – формирование комплекса знаний о взаимосвязи между физическими и физико-химическими свойствами веществ с их строением с позиций учения о симметрии молекул и кристаллов. Задачи дисциплины: • изучение структур молекул и кристаллов с позиций учения о симметрии; • формирование умений анализировать строение и физико-химические свойства молекул и кристаллов на основе теории симметрии; • формирование навыков установления взаимосвязи между свойствами и структурой веществ на основе фундаментальных положений структурной химии (таблицы характеров симметрии, модели структур идеальных и реальных кристаллов, энтальпия кристаллических решеток)..

Изучаемые объекты дисциплины

Предметом освоения дисциплины являются следующие объекты: – элементы и операции симметрии, точечные группы симметрии для молекулярных структур, представления о таблицах характеров; – симметрия кристаллических структур, решетки Бравэ, индексы граней кристаллов и плоскостей симметрии; – описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок; – типы структуры металлов и ионных кристаллов; – энтальпия решетки ионных кристаллов; – реальные кристаллы, дефекты структур, свойства твердых веществ с дефектами структуры..

Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		4	
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	72	72	
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:			
- лекции (Л)	16	16	
- лабораторные работы (ЛР)			
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	54	54	
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2	
- контрольная работа			
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	72	72	
2. Промежуточная аттестация			
Экзамен			
Дифференцированный зачет	9	9	
Зачет			
Курсовой проект (КП)			
Курсовая работа (КР)			
Общая трудоемкость дисциплины	144	144	

Краткое содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
4-й семестр				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Реальные кристаллы и их свойства	4	0	14	18
<p>Тема 7. Твердые тела с дефектами структуры Основные типы дефектов твердых тел. Термодинамическое обоснование образования дефектов в твердых телах. Типы собственных дефектов кристаллов. Дефекты Шоттки и Френкеля. Типы примесных дефектов. Краевые дислокации и их влияние на свойства твердых тел. Винтовые дислокации и рост кристаллов. Нестехиометрические соединения. Дефекты и нестехиометрия. Твердые растворы и серии дискретных фаз, их свойства. Диффузия атомов и ионов. Законы Фика. Механизмы диффузии в твердых телах. Энергия активации процесса диффузии.</p> <p>Тема 8. Современные материалы с дефектами структуры Твердые электролиты. Сенсоры. Электрическая проводимость твердых тел. Металлы. Полупроводники. Диэлектрики. Влияние степени окисления металлов в оксидах на их электрическую проводимость. Материалы с магнитными свойствами. Парамагнетики. Ферромагнетики. Ферримагнетики. Сверхпроводники. Высокотемпературная сверхпроводниковая керамика.</p>				
Симметрия кристаллов и модели структур твердых тел	4	0	14	20
<p>Тема 3 Симметрия кристаллических структур Элементарная ячейка идеального кристалла. Линейные и угловые параметры. Периоды трансляции. Кристаллические системы (сингонии). Решетки Браве. Элементы симметрии. Индексы направлений, граней и плоскостей симметрии.</p> <p>Тема 4 Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок Модели плотнейшей упаковки шаров. Тетраэдрические и октаэдрические пустоты в модели плотнейшей упаковки шаров. Металлы в представлениях о плотнейшей упаковке шаров. Структуры не отвечающие требованиям плотнейшей упаковки шаров. Понятия изоморфизма и полиморфизма. Сплавы замещения и внедрения. Интерметаллические соединения. Ионные</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
кристаллы. Типовые структуры ионных кристаллов. Зависимость координационных чисел ионов от отношения ионных радиусов.				
Энтальпия и свойства ионных кристаллов	4	0	14	16
Тема 5. Энтальпия решетки ионных кристаллов. Энтальпия ионной решетки. Цикл Борна-Габера. Вычисление энергии кристаллической решетки на основе энергии электро-статического взаимодействия ионов. Учет отталкивания ионов при перекрывании их атомных орбиталей в расчете энергии кристаллической решетки. Уравнение Капустинского. Термические радиусы ионов. Тема 6. Прогнозирование свойств веществ на основе представлений об их структуре Оценка термической стабилизации ионных твердых тел. Стабилизация высших степеней окисления металлов анионами малых размеров. Оценка растворимости ионных кристаллов.				
Учение о симметрии и симметрия молекул	4	0	12	18
Тема 1. Учение о симметрии Учение о симметрии. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Методика определения точечных групп симметрии молекул Характеристики. Представления о таблицах характеров. Тема 2. Возможности предсказания свойств молекулярных веществ на основе теории симметрии Симметрия и полярность молекул. Симметрия и хиральность молекул. Оптическая изомерия. Элементы теории групп и таблицы характеров. Оценка характеров для точечной группы C_{2v} и молекулярные колебания молекулы H_2O . Симметрия молекулярных колебаний и выявление колебаний активных в ИК спектрах.				
ИТОГО по 4-му семестру	16	0	54	72
ИТОГО по дисциплине	16	0	54	72