

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:

ФИО: Исаев Игорь Магомедович

Должность: Проректор по учебной работе

Дата подписания: 31.07.2023 16:45:58

Уникальный идентификатор документа:

d7a26b9e8ca85e98ec3de2eb454b4659d061f249

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

## Аннотация рабочей программы учебной дисциплины

# Электронная структура, природа химической связи и свойства неорганических соединений

Закреплена за подразделением

Кафедра физической химии

Направление подготовки

22.04.01 МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИИ МАТЕРИАЛОВ

Профиль

Высокотемпературные и сверхтвёрдые материалы

Квалификация

Магистр

Форма обучения

очная

Общая трудоемкость

3 ЗЕТ

Часов по учебному плану

108

Формы контроля в семестрах:

в том числе:

экзамен 3

аудиторные занятия

34

самостоятельная работа

38

часов на контроль

36

### Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	3 (2.1)		Итого	
	19			
Неделя	уп	рп	уп	рп
Вид занятий				
Лекции	17	17	17	17
Практические	17	17	17	17
Итого ауд.	34	34	34	34
Контактная работа	34	34	34	34
Сам. работа	38	38	38	38
Часы на контроль	36	36	36	36
Итого	108	108	108	108

**1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ**

1.1	1.1	Цель и задачи дисциплины
1.2		Цель – сформировать теоретические представления и практические навыки в использовании основных методов теории химических связей для расчетов энергии взаимодействия в гетерополярных и гомеополярных молекулах, энергии кристаллической решетки твердых тел, сил и энергии межмолекулярного взаимодействия молекул.
1.3		Задачи дисциплины:
1.4	1.	использовать методы квантовой механики и теории химической связи для анализа химической устойчивости молекул, их реакционной способности, энергии связи и энергии образования простых гомо- и гетероядерных молекул и ионных кристаллов;
1.5	2.	составлять физические модели и математические уравнения, позволяющие описывать физико-химические свойства простых гомо- и гетероядерных молекул и ионных кристаллов;
1.6	3.	осуществлять расчеты энергии связи и энергии образования молекул и ионных кристаллов из атомов и расчеты реакционной способности атомов в молекуле, дипольного момента молекулы, энергии межмолекулярного взаимодействия.

**2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ**

Блок ОП:		Б1.В
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Высокотемпературные и сверхтвердые покрытия	
2.1.2	Жаростойкие и теплозащитные покрытия	
2.1.3	Производственная практика	
2.1.4	Физико-химия получения и обработки высокотемпературных и сверхтвердых материалов	
2.1.5	Высокотемпературная прочность материалов	
2.1.6	Высокотемпературные и сверхтвердые функциональные и конструкционные материалы	
2.1.7	Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве	
2.1.8	Материаловедение и технологии перспективных материалов	
2.1.9	Порошковая металлургия высокотемпературных и сверхтвердых материалов	
2.1.10	Спектроскопические (и зондовые) методы исследования материалов	
2.1.11	Тайм-менеджмент	
2.1.12	Управление коллективами	
2.1.13	Математическое и компьютерное моделирование материалов и процессов	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	
2.2.1	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	
2.2.2	Преддипломная практика	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

<b>ОПК-1: Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов и знаний в междисциплинарных областях</b>
<b>Знать:</b>
ОПК-1-31 современную классификацию и основные типы неорганических соединений;
ОПК-1-32 электронную структуру атомов элементов;
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий</b>
<b>Знать:</b>
УК-1-32 методы математической физики для решения задач, связанных со строением не-органических и органических молекул, прогнозированием их химических и физических свойств.
УК-1-31 природу взаимосвязи между энергией связи, температурой плавления и упругими модулями

<b>ПК-1: Способен с учётом результатов исследований и контроля свойств высокотемпературных и сверхтвёрдых материалов (ВТиСТМ) на основе тугоплавких металлов, керамики, углеродных систем, их композиций, алмазов и нитрида бора (в том числе с наноструктурой) и конкретных условий их эксплуатации обосновывать и разрабатывать наиболее рациональные способы их получения с заданной структурой и составом</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-1-У1 осуществлять расчеты реакционной способности атомов в молекуле, дипольного момента молекулы, энергии межмолекулярного взаимодействия
<b>ОПК-1: Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов и знаний в междисциплинарных областях</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-1-У1 рассчитывать энергию связи и теплоты плавления и испарения
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий</b>
<b>Уметь:</b>
УК-1-У1 анализировать и обрабатывать полученные результаты с применением программных средств и персональной компьютерной техники
<b>ПК-1: Способен с учётом результатов исследований и контроля свойств высокотемпературных и сверхтвёрдых материалов (ВТиСТМ) на основе тугоплавких металлов, керамики, углеродных систем, их композиций, алмазов и нитрида бора (в том числе с наноструктурой) и конкретных условий их эксплуатации обосновывать и разрабатывать наиболее рациональные способы их получения с заданной структурой и составом</b>
<b>Владеть:</b>
ПК-1-В1 навыками определения энергии связи и энергии образования молекул и ионных кристаллов из атомов
ПК-1-В2 навыками по применению ММО и метода Хюккеля для расчёта энергии связи в молекулах неорганических материалов.
<b>ОПК-1: Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов и знаний в междисциплинарных областях</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-1-В1 навыками построения диаграмм Эшби для анализа природы химической связи и свойств элементов и ионных кристаллов (CES EDUPack)
<b>УК-1: Способен осуществлять критический анализ новых и сложных инженерных объектов, процессов и систем в междисциплинарном контексте, проблемных ситуаций на основе системного подхода, выбрать и применить наиболее подходящие и актуальные методы из существующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов или новых и инновационных методов, вырабатывать стратегию действий</b>
<b>Владеть:</b>
УК-1-В1 навыками построения диаграмм Эшби для анализа природы химической связи и свойств элементов и ионных кристаллов (CES EDUPack)