

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кубанский государственный университет»
Факультет химии и высоких технологий

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по учебной работе,
качеству образования – первый
проректор



подпись

Хагуров Т.А.

« 29 »

мая

2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.О.31 СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА

Направление подготовки – 04.03.01 Химия

Направленность/профиль – Аналитическая химия

Форма обучения – очная

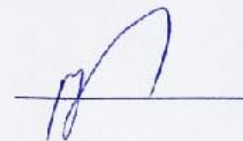
Квалификация выпускника – бакалавр

Краснодар 2020

Рабочая программа дисциплины «Строение вещества» составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.03.01 Химия.

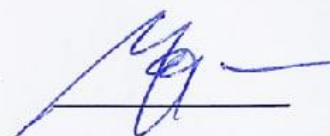
Программу составил(и) :

В.И. Зеленев, доцент, кандидат химических наук



Рабочая программа дисциплины «Строение вещества» утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии протокол № 10 от «15» 05 2020 г.

Заведующий кафедрой (разработчика) Буков Н.Н.



Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры аналитической химии протокол № 6 от «15» 05 2020 г.

Заведующий кафедрой (выпускающей) Темердашев З.А.



Утверждена на заседании учебно-методической комиссии факультета Химии и высоких технологий

протокол № 5 от «25» 05 2020 г.

Председатель УМК факультета Беспалов А.В.



Рецензенты:

Кононенко Н.А., док. хим. наук, профессор кафедры физической химии ФГБОУ ВО «КубГУ»

Петров Н.Н., канд. хим. наук, генеральный директор ООО «Интеллектуальные композиционные решения»

1 Цели и задачи изучения дисциплины (модуля)

1.1 Цель освоения дисциплины

Формирование готовности к профессиональной деятельности, связанной с прогнозированием свойств веществ и механизмов протекания химических процессов на основе данных о структуре вещества и фундаментальных положений квантовомеханической теории, в соответствии с компетентностным подходом.

1.2 Задачи дисциплины

- Овладение системой фундаментальных химических понятий в области квантовой механики и строения вещества, необходимых в дальнейшей профессиональной деятельности;

- Раскрытие роли современных теорий, описывающих строение вещества, как основы теоретической и экспериментальной химии;

- Формирование умения применять теоретические знания в области строения вещества для решения практических задач дальнейшей профессиональной деятельности.

1.3 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Б1.О.31 Строение вещества» относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» учебного плана.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся общепрофессиональной компетенции (ОПК)

| № п.п. | Индекс компетенции | В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны | | |
|--------|--|--|--|--|
| | | знать | уметь | владеть |
| 1. | ОПК-4 – Способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач | Фундаментальные законы и понятия химии, необходимые для прогнозирования свойств химических веществ и условий протекания химических реакций с точки зрения строения исследуемых веществ | Использовать полученные знания при решении профессиональных задач, возникающих в ходе практической деятельности при исследовании химических процессов и свойств химических веществ | Способами использования полученных знаний теоретических основ фундаментальной химии при решении профессиональных задач |

2. Структура и содержание дисциплины

2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 3 зач. ед. (108 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице.

| Вид учебной работы | | Всего часов | Семестр (часы) | |
|---|--------------------------------------|-------------|----------------|---|
| | | | 4 | 5 |
| Контактная работа, в том числе: | | | | |
| Аудиторные занятия (всего): | | 68 | 68 | - |
| Занятия лекционного типа | | 34 | 34 | - |
| Лабораторные занятия | | | | |
| Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия) | | 34 | 34 | |
| Иная контактная работа: | | | | |
| Контроль самостоятельной работы (КСР) | | 2 | 2 | - |
| Промежуточная аттестация (ИКР) | | 0,2 | 0,2 | - |
| Самостоятельная работа, в том числе: | | | | |
| Курсовая работа | | - | - | - |
| Проработка учебного (теоретического) материала | | 27,8 | 27,8 | |
| Выполнение индивидуальных заданий (подготовка сообщений, презентаций) | | - | - | - |
| Реферат | | 10 | 10 | - |
| Подготовка к текущему контролю | | - | - | - |
| Контроль | | | | |
| Подготовка к экзамену | | - | - | - |
| Общая трудоёмкость | час. | 108 | 108 | - |
| | в том числе контактная работа | 70,2 | 70,2 | - |
| | зач.ед. | 3 | 3 | - |

2.2 Структура дисциплины

Распределение видов учебной работы и их трудоёмкости по разделам дисциплины.

Разделы (темы) дисциплины, изучаемые в 4 семестре (очная форма)

| № | Наименование разделов(тем) | Кол-во часов | | | | |
|---------------------------------------|---|--------------|-------------------|-----------|----------|----------------------|
| | | всего | Аудиторная работа | | | Внеаудиторная работа |
| | | | Л | ПЗ | ЛР | |
| | | | СРС | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 1 | Квантовомеханическая теория строения вещества | 34 | 12 | 10 | - | 12 |
| 2 | Симметрия молекул | 20 | 6 | 6 | - | 8 |
| 3 | Энергетические аспекты строения молекул. Электрические и магнитные свойства веществ | 23,8 | 6 | 10 | - | 7,8 |
| 4 | Строение вещества в конденсированном состоянии | 28 | 10 | 8 | - | 10 |
| ИТОГО по разделам дисциплины | | 105,8 | 34 | 34 | - | 37,8 |
| Контроль самостоятельной работы (КСР) | | 2 | | | | |
| Промежуточная аттестация (ИКР) | | 0,2 | | | | |
| Подготовка к текущему контролю | | - | - | - | - | - |
| Общая трудоёмкость по дисциплине | | 108 | | | | |

2.3 Содержание разделов (тем) дисциплины

2.3.1 Занятия лекционного типа

| № | Наименование раздела (темы) | Содержание раздела | Форма текущего контроля |
|----|---|--|-------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1. | Квантово-механическая теория строения вещества | <p>Математический аппарат квантовой химии. Операторы, собственные функции и собственные значения. Оператор Гамильтона. Соотношение неопределенности.</p> <p>Основные постулаты квантовой химии.</p> <p>Задачи о свободном движении частицы, движении частицы в потенциальном ящике.</p> <p>Эмпирические и полуэмпирические методы в квантовой химии.</p> | У |
| 2. | Симметрия молекул | <p>Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии. Точечные группы симметрии. Приводимые и неприводимые представления.</p> <p>Классификация атомов и молекул. Параметры, определяющие геометрию молекулы, межъядерные расстояния, валентные углы. Внутренние вращения молекул. Понятие конформации молекул. Шахматные и затененные конфигурации.</p> | У |
| 3. | Энергетические аспекты теории строения вещества. Электрические и магнитные свойства веществ | <p>Энергетический критерий существования некоторой совокупности эффективных атомов как единой частицы – молекулы. Энергия образования молекул из свободных атомов.</p> <p>Парциальные энергии отдельных видов химической связи одного вида в любых молекулах.</p> <p>Энергия образования молекулы. Постоянство энергии связей одного вида в молекулах.</p> <p>Энергия стабилизации кристаллическим полем, как эффект влияния строения молекул на их свойства.</p> <p>Электрический дипольный момент в классической теории и квантовой механике.</p> <p>Полярные и неполярные вещества. Дипольный момент и изомерия молекул.</p> <p>Парциальные моменты связей и структурных групп. Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов.</p> <p>Деформация молекул во внешнем электрическом поле. Индуцированный момент и поляризуемость молекул. Средняя поляризуемость, анизотропия поляризуемости.</p> <p>Связь молекулярных постоянных – дипольного момента и поляризуемости – с макроскопическими характеристиками вещества.</p> <p>Молярная рефракция. Эмпирическая схема расчета рефракций.</p> | Р |

| | | | |
|----|--|---|---|
| | | <p>Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекул в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Ферромагнетизм.</p> <p>Зеемановские уровни энергии. Условия ядерного магнитного резонанса.</p> <p>Химический сдвиг и его интерпретация. ЭПР. Парамагнитные частицы.</p> <p>Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих. Межмолекулярное взаимодействие.</p> <p>Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии.</p> <p>Электронные состояния, колебательные состояния, вращательные состояния.</p> <p>Вращательные, колебательные и электронные спектры.</p> <p>Теория кристаллического поля и теория поля лигандов как основа интерпретации спектров комплексных соединений.</p> <p>Правила отбора.</p> <p>Значение молекулярных спектров для решения практических задач химической науки.</p> | |
| 4. | Строение вещества в конденсированном состоянии | <p>Структурная классификация конденсированных фаз.</p> <p>Диаграммы состояния. Мгновенная колебательно-усредненная структура жидкостей. Современные способы описания структуры жидкостей. Аморфные вещества. Жидкие кристаллы (холестерики, нематики и пр.). Идеальные кристаллы.</p> <p>Особенности ультрадисперсного состояния веществ.</p> <p>Структура границы раздела конденсированных фаз.</p> | У |

2.3.2 Занятия семинарского типа

| № | Наименование раздела (темы) | Тематика практических занятий (семинаров) | Форма текущего контроля |
|----|--|---|-------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 1. | Квантово-механическая теория строения вещества | <p>Математический аппарат квантовой химии. Операторы, собственные функции и собственные значения. Основные постулаты квантовой химии.</p> <p>Уравнение Шредингера.</p> <p>Задачи о свободном движении частицы, движении частицы в потенциальном ящике.</p> <p>Эмпирические и полуэмпирические методы в квантовой химии.</p> | У |
| 2. | Симметрия молекул | <p>Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии. Точечные группы симметрии. Приводимые и неприводимые представления.</p> | У |

| | | | |
|----|---|---|---|
| 3. | Энергетические аспекты теории строения вещества. Электрические и магнитные свойства веществ | <p>Энергия образования молекулы.</p> <p>Энергия стабилизации кристаллическим полем как эффект влияния строения молекул на их свойства.</p> <p>Электрический дипольный момент в классической теории и квантовой механике.</p> <p>Парциальные моменты связей и структурных групп.</p> <p>Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов.</p> <p>Связь молекулярных постоянных – дипольного момента и поляризуемости – с макроскопическими характеристиками вещества.</p> <p>Молярная рефракция. Эмпирическая схема расчета рефракций.</p> <p>Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекул в магнитном поле.</p> <p>Диамагнитные и парамагнитные вещества. Ферромагнетизм.</p> <p>ЯМР-спектроскопия. Условия ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг. Релаксационные явления.</p> <p>Шифт-реагенты</p> <p>Химический сдвиг и его интерпретация. ЭПР. Парамагнитные частицы.</p> <p>Полная энергия молекулы как сумма электронной, колебательной и вращательной составляющих.</p> <p>Относительное положение электронных, колебательных и вращательных уровней энергии.</p> <p>Вращательные, колебательные и электронные спектры.</p> <p>Правила отбора.</p> <p>Значение молекулярных спектров для решения практических задач химической науки.</p> | Р |
| 4. | Строение вещества в конденсированном состоянии | <p>Диаграммы состояния. Структура и свойства жидкостей, структура твёрдого тела. Зонная теория проводимости.</p> <p>Жидкие кристаллы.</p> <p>Особенности ультрадисперсного состояния веществ.</p> <p>Межмолекулярное взаимодействие</p> <p>Комплексные соединения. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов.</p> | У |

Устный опрос (У), написание реферата (Р)

2.3.3 Лабораторные занятия

Не предусмотрены

2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Курсовые работы не предусмотрены.

2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

| № | Вид СРС | Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины по выполнению самостоятельной работы |
|---|--|---|
| 1 | 2 | 3 |
| 1 | Проработка учебного (теоретического) материала | <ol style="list-style-type: none"> 1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. – 4-е изд. (эл.) - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5-00101-502-4. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104#book_name 2. Камышов, В.М. Строение вещества [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. - 2-е изд., испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2017. - 236 с. - https://e.lanbook.com/book/90007#authors. 3. Сизова, О.В. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / О.В. Сизова, Н.В. Иванова, А.А. Ванин. - Изд. 2-е, перераб. и доп. – СПб.: Издательство «Лань», 2016. - 276 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-2173-2. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/76285#book_name 4. Минкин, В.И. Теория строения молекул [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с. - (Учебники и учебные пособия). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 5222001067 5. Журнал общей химии 6. Журнал неорганической химии 7. Журнал физической химии |
| 2 | Реферат | <ol style="list-style-type: none"> 1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. – 4-е изд. (эл.) - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5-00101-502-4. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104#book_name 2. Камышов, В.М. Строение вещества [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. - 2-е изд., испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2017. - 236 с. - https://e.lanbook.com/book/90007#authors. 3. Сизова, О.В. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / О.В. Сизова, Н.В. Иванова, А.А. Ванин. - Изд. 2-е, перераб. и доп. – СПб.: Издательство «Лань», 2016. - 276 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-2173-2. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/76285#book_name 4. Минкин, В.И. Теория строения молекул [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с. - |

| | |
|--|---|
| | (Учебники и учебные пособия). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 5222001067 |
| | 5. Журнал общей химии |
| | 6. Журнал неорганической химии |
| | 7. Журнал физической химии |

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

– в печатной форме с увеличенным шрифтом.

Для лиц с нарушениями слуха:

– в печатной форме.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

– в печатной форме.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

3. Образовательные технологии

В учебном процессе по дисциплине «Строение вещества» используются консервативные (лекции), репродуктивные (практические занятия) и творческие (подготовка рефератов) педагогические технологии.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья используются образовательные технологии, позволяющие полностью индивидуализировать содержание, методы и темпы учебной деятельности, вносить вовремя необходимые коррективы как в деятельность студента инвалида, так и в деятельность преподавателя.

4. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Оценочные средства предназначены для контроля и оценки образовательных достижений обучающихся, освоивших программу учебной дисциплины «Б1.О.31 Строение вещества».

Оценочные средства включают контрольные материалы для проведения **текущего контроля** в форме вопросов, заданий и тем для самостоятельной работы и **промежуточной аттестации** в форме вопросов и заданий для подготовки к зачету.

Оценочные средства для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья выбираются с учетом их индивидуальных психофизических особенностей.

– при необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на экзамене;

– при проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями;

– при необходимости для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья и инвалидов процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине (модулю) предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации:

Для лиц с нарушениями зрения:

- в печатной форме увеличенным шрифтом,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями слуха:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Для лиц с нарушениями опорно-двигательного аппарата:

- в печатной форме,
- в форме электронного документа.

Данный перечень может быть конкретизирован в зависимости от контингента обучающихся.

Структура оценочных средств для текущей и промежуточной аттестации

| № п/п | Контролируемые разделы (темы) дисциплины | Код контролируемой компетенции (или ее части) | Наименование оценочного средства | |
|-------|---|---|----------------------------------|--------------------------|
| | | | Текущий контроль | Промежуточная аттестация |
| 1 | Квантовомеханическая теория строения вещества | ОПК-4 | У | Зачет |
| 2 | Симметрия молекул | ОПК-4 | У | Зачет |
| 3 | Энергетические аспекты теории строения вещества. Электрические и магнитные свойства веществ | ОПК-4 | Р | Зачет |
| 4 | Строение вещества в конденсированном состоянии | ОПК-4 | У | Зачет |

Показатели, критерии и шкала оценки сформированных компетенций

| Код и наименование компетенции | Состав уровней освоения компетенции планируемым результатам обучения и критериям их оценивания | | |
|--|--|---|--|
| | пороговый | базовый | продвинутый |
| | Оценка | | |
| | Удовлетворительно/зачтено | Хорошо/зачтено | Отлично/зачтено |
| ОПК-4 – Способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и пра- | <i>Знает:</i> Основные законы и понятия химии, необходимые для прогнозирования свойств химических веществ и условий протекания химических реакций с точки зрения строения исследуемых веществ <i>Умеет:</i> Использовать полученные знания при решении базовых профессиональных задач, возникающих в ходе практической деятель- | <i>Знает:</i> Законы и понятия химии, необходимые для прогнозирования свойств химических веществ и условий протекания химических реакций с точки зрения строения исследуемых веществ <i>Умеет:</i> Использовать полученные знания при решении профессиональных задач, возникающих в ходе практической деятельности | <i>Знает:</i> Фундаментальные законы и понятия химии, необходимые для прогнозирования свойств химических веществ и условий протекания химических реакций с точки зрения строения исследуемых веществ <i>Умеет:</i> Творчески применять полученные знания при решении нестандартных профессиональных задач, возникающих в ходе практической деятель- |

| | | | |
|---|--|---|---|
| критических навыков решения математических и физических задач | ности при исследовании химических процессов и свойств химических веществ <i>Владеет:</i> Базовыми приемами использования полученных знаний теоретических основ химии при решении профессиональных задач | при исследовании химических процессов и свойств химических веществ <i>Владеет:</i> Приемами использования полученных знаний теоретических основ фундаментальной химии при решении профессиональных задач | ности при исследовании химических процессов и свойств химических веществ <i>Владеет:</i> Приемами использования полученных знаний в области фундаментальной химии при решении нестандартных профессиональных задач |
|---|--|---|---|

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Вопросы и задания для текущего контроля

1. В чём заключается разница понятий функция, функционал, оператор? (ОПК-4)
2. Сформулируйте понятие коммутатора операторов (ОПК-4).
3. Какие операторы называют Эрмитовыми? (ОПК-4)
4. Что такое операторные уравнения? (ОПК-4)
5. Какие функции называют собственными? (ОПК-4)
6. Определите понятие «Собственные значения» (ОПК-4).
7. В чем сущность термина «Вырождение функций»? (ОПК-4)
8. Какие операторы квантовой механики Вам известны? (ОПК-4)
9. Оператор Гамильтона (ОПК-4).
10. Запишите выражение оператора набла (ОПК-4).
11. Запишите выражение принципа неопределенности (ОПК-4).
12. Перечислите основные постулаты квантовой механики (ОПК-4).
13. Запишите уравнение Шредингера (ОПК-4).
14. В чём преимущество использования сферических координат при решении квантомеханических задач? (ОПК-4)
15. Почему для атома водорода и водородоподобного атома могут быть получены точные волновые функции путем прямого решения уравнения Шредингера? (ОПК-4)
16. Объясните сущность метода Хартри-Фока (ОПК-4).
17. АО Слэтера-Зеннера (ОПК-4).
18. Термы многоэлектронных атомов (ОПК-4).
19. Система термов (ОПК-4).
20. Правила Пфёнда для определения основного терма (ОПК-4).
21. Эффект Зеемана (ОПК-4).
22. LS и JJ-связь (ОПК-4).
23. Приближение Борна-Оппенгеймера (ОПК-4).
24. Метод Гайтлера-Лондона (ОПК-4).
25. Метод МО ЛКАО (ОПК-4).
26. Уравнение Рутаана (ОПК-4).
27. Полуэмпирические методы в квантовой химии (ОПК-4).
28. Метод Хюккеля (ОПК-4).
29. Метод Фроста (ОПК-4).
30. Ароматичность и антиароматичность (ОПК-4).
31. Коммутируют ли операторы A и B если $A = x$; $B = y$? (ОПК-4)

32. Линеен ли оператор $A = x^2$? (ОПК-4)
33. Докажите линейность оператора d/dx (ОПК-4).
34. Докажите, что оператор $i d/dx$ линеен и эрмитов (ОПК-4).
35. Удовлетворяет ли функция $\exp(ax)$ уравнению $Lf = \lambda f$, если $L = d^2/dx^2$? (ОПК-4)
36. Оцените коэффициент прозрачности потенциального барьера, если: $D_0 \approx 1$, $U_0 - E = 10^{-18}$ Дж, $\mu = 10^{-30}$ кг, $l = 10^{-10}$ м (ОПК-4).
37. В рамках JJ-связи установите термы для электронной конфигурации sp (ОПК-4).
38. Установите все возможные термы для системы из двух p-электронов, выберите на основании известных Вам правил основной терм (используйте схему Рассела-Саундерса) (ОПК-4).
39. Определите константу экранирования S для АО $1s, 2p, 3p$ атома хлора (ОПК-4).
40. Определите эффективный заряд ядра для $6s$ электрона атома гадолиния (ОПК-4).
41. Используя МОХ, постройте диаграмму энергетических уровней π -МО и схемы их заполнения электронами для циклопропенильной системы (случай катиона, радикала и аниона) (ОПК-4).
42. Используя графический метод Фроста определите энергетические уровни циклопентадиенила и бензола (ОПК-4).
43. Перечислите основные элементы симметрии молекул (ОПК-4).
44. Дайте определение понятию «группа» (ОПК-4).
45. Что такое точечная группа симметрии? (ОПК-4)
46. Определите операцию умножения для точечной группы симметрии (ОПК-4).
47. Каким образом можно отличить абелевы и неабелевы группы? (ОПК-4)
48. Какие группы симметрии наиболее характерны для молекул? (ОПК-4)
49. К какой группе симметрии можно отнести гомоядерные двухатомные молекулы? (ОПК-4)
50. К какой группе симметрии можно отнести гетероядерные двухатомные молекулы? (ОПК-4)
51. Что называют характером группы? (ОПК-4)
52. Дайте определение термина «Представление группы» (ОПК-4).
53. Какие представления относят к неприводимым? (ОПК-4)
54. Какие представления обозначаются t_g ? (ОПК-4)
55. Какие представления обозначаются b_1 ? (ОПК-4)
56. Какие представления обозначаются a_1 ? (ОПК-4)
57. Какие представления обозначаются e ? (ОПК-4)
58. Определите элементы симметрии и группу симметрии молекулы аммиака (ОПК-4).
59. Постройте таблицу умножения для элементов симметрии молекулы аммиака (ОПК-4).
60. Постройте квадрат Кэли для группы C_{2v} (ОПК-4).
61. Охарактеризуйте преобразование p-орбиталей при операциях симметрии группы C_{2v} (ОПК-4).
62. Охарактеризуйте преобразование d-орбиталей при операциях симметрии группы C_{2v} (ОПК-4).
63. Определите характеры неприводимых представлений группы C_{2v} в базисе p-орбиталей (ОПК-4).
64. Определите характеры неприводимых представлений группы C_{2v} в базисе d-орбиталей (ОПК-4).
65. Чему равно число неприводимых представлений группы? (ОПК-4)
66. Приведите примеры молекул с группой симметрии D_{3h} (ОПК-4).
67. Приведите примеры молекул с группой симметрии D_{5h} (ОПК-4).
68. Приведите примеры аморфных веществ (ОПК-4).
69. Какие свойства являются необходимым признаком кристалла? (ОПК-4)
70. Какие теории строения жидкости Вам известны? (ОПК-4)
71. Дайте определение термину «Молярная рефракция» (ОПК-4)

72. При каких обстоятельствах были открыты мезоморфные свойства веществ? (ОПК-4)
73. Какую форму молекул имели жидкокристаллические вещества, открытые Рейнитцером? (ОПК-4)
74. В чем разница между лиотропными и термотропными жидкокристаллическими веществами? (ОПК-4)
75. В литературе распространен термин «дискотики», что он обозначает? (ОПК-4)
76. В каких целях используется явление экзальтации рефракции? (ОПК-4)
77. Что понимают под термином «жидкокристаллическое термопокрывало»? (ОПК-4)

Задания

При 293К плотность а%-го раствора вещества А в воде равна d г/см³, показатель преломления n . Вычислите молярную рефракцию вещества а, если для воды плотность составляет 1,000г/см³, а показатель преломления – 1,333 (ОПК-4).

| № | а% | Вещество А | d | n |
|-----|--------|---|-------|-------|
| 78. | 31,000 | HCl | 1,157 | 1,407 |
| 79. | 30,000 | H ₂ SO ₄ | 1,220 | 1,370 |
| 80. | 40,012 | HClO ₃ | 1,293 | 1,367 |
| 81. | 17,034 | LiBr | 1,129 | 1,362 |
| 82. | 35,002 | LiCl | 1,174 | 1,414 |
| 83. | 24,501 | NaCl | 1,187 | 1,377 |
| 84. | 12,505 | Na ₂ SO ₄ | 1,116 | 1,352 |
| 85. | 9,0401 | K ₂ SO ₄ | 1,075 | 1,345 |
| 86. | 44,012 | C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁ | 1,191 | 1,406 |
| 87. | 44,023 | CO(NH ₂) ₂ | 1,121 | 1,400 |

88. Дипольный момент. Полярные и неполярные вещества (ОПК-4).
89. Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов (ОПК-4).
90. Магнитный момент и магнитная восприимчивость веществ (ОПК-4).
91. Методы ЭПР и ЯМР (ОПК-4).
92. Электронные, колебательные и вращательные уровни энергии (ОПК-4).
93. Молекулярные спектры. Правила отбора (ОПК-4).
94. Энергетические критерии существования молекул (ОПК-4).
95. Дисперсионное, ориентационное и индукционное взаимодействие (ОПК-4).
96. Энергия химических связей и методы её определения (ОПК-4).
97. Эксимеры и эксиплексы (ОПК-4).
98. Теория кристаллического поля (ОПК-4).
99. Спектрохимический ряд (ОПК-4).
100. Теорема Яна-Теллера (ОПК-4).

Примерные темы рефератов

1. Силы Ван-дер-Ваальса (ОПК-4).
2. Раман-спектроскопия и её применение в исследовании химических веществ (ОПК-4).
3. Спектры люминисценции (ОПК-4).
4. Магнитная восприимчивость веществ. Ферромагнетизм. Антиферромагнетизм. Ферримагнетики (ОПК-4).
5. Молекулярные магниты и перспективы их использования (ОПК-4).
6. Ориентационное и дисперсионное взаимодействия и их влияние на свойства веществ (ОПК-4).
7. Методы определения дипольных моментов химических соединений (ОПК-4).
8. ЭПР-спектроскопия и её применение к решению структурно-химических задач (ОПК-4).
9. Энергия химических связей и методы её определения (ОПК-4).

10. Эксимеры и эксиплексы (ОПК-4).
11. Спектроскопия ЯМР-высокого разрешения в исследовании структуры органических веществ (ОПК-4).
12. ИК-спектроскопия. Применение ИК-спектров в качественном и количественном анализе (ОПК-4).
13. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ОПК-4).

Зачетно-экзаменационные материалы для промежуточной аттестации (зачет)

Вопросы для подготовки к зачету

1. В чём заключается разница понятий функция, функционал, оператор?
2. Сформулируйте понятие коммутатора операторов.
3. Какие операторы называют Эрмитовыми?
4. Что такое операторные уравнения?
5. Какие функции называют собственными?
6. Определите понятие «Собственные значения».
7. В чем сущность термина «Вырождение функций»?
8. Какие операторы квантовой механики Вам известны?
9. Оператор Гамильтона.
10. Запишите выражение оператора набла.
11. Запишите выражение принципа неопределенности.
12. Перечислите основные постулаты квантовой механики.
13. Запишите уравнение Шредингера.
14. В чём преимущество использования сферических координат при решении квантовомеханических задач?
15. Почему для атома водорода и водородоподобного атома могут быть получены точные волновые функции путем прямого решения уравнения Шредингера?
16. Объясните сущность метода Хартри-Фока.
17. АО Слэтера-Зеннера.
18. Термы многоэлектронных атомов.
19. Система термов.
20. Правила Пфёнда для определения основного терма.
21. Эффект Зеемана.
22. LS и JJ-связь.
23. Приближение Борна-Оппенгеймера.
24. Метод Гайтлера-Лондона.
25. Метод МО ЛКАО.
26. Уравнение Рутаана.
27. Полуэмпирические методы в квантовой химии.
28. Метод Хюккеля.
29. Метод Фроста.
30. Аromaticность и антиaromaticность.
31. Коммутируют ли операторы A и B если $A = x$; $B = y$?
32. Линеен ли оператор $A = x^2$?
33. Докажите линейность оператора d/dx .
34. Докажите, что оператор $\hat{p} = d/dx$ линеен и эрмитов.
35. Удовлетворяет ли функция $\exp(ax)$ уравнению $Lf = Lf$, если $L = d^2/dx^2$?
36. Оцените коэффициент прозрачности потенциального барьера, если: $D_0 \approx 1$, $U_0 - E = 10^{-18}$ Дж, $\mu = 10^{-30}$ кг, $l = 10^{-10}$ м.
37. В рамках JJ-связи установите термы для электронной конфигурации sp .

38. Установите все возможные термы для системы из двух р-электронов, выберите на основании известных Вам правил основной терм (используйте схему Рассела-Саундерса).
39. Определите константу экранирования S для АО $1s, 2p, 3p$ атома хлора.
40. Определите эффективный заряд ядра для $6s$ электрона атома гадолиния.
41. Используя МОХ, постройте диаграмму энергетических уровней π -МО и схемы их заполнения электронами для циклопропенильной системы (случаи катиона, радикала и аниона).
42. Используя графический метод Фроста определите энергетические уровни циклопентадиенила и бензола.
43. Перечислите основные элементы симметрии молекул.
44. Дайте определение понятию «группа».
45. Что такое точечная группа симметрии?
46. Определите операцию умножения для точечной группы симметрии.
47. Каким образом можно отличить абелевы и неабелевы группы?
48. Какие группы симметрии наиболее характерны для молекул?
49. К какой группе симметрии можно отнести гомоядерные двухатомные молекулы?
50. К какой группе симметрии можно отнести гетероядерные двухатомные молекулы?
51. Что называют характером группы?
52. Дайте определение термина «Представление группы».
53. Какие представления относят к неприводимым?
54. Какие представления обозначаются t_g ?
55. Какие представления обозначаются b_1 ?
56. Какие представления обозначаются a_1 ?
57. Какие представления обозначаются e ?
58. Определите элементы симметрии и группу симметрии молекулы аммиака.
59. Постройте таблицу умножения для элементов симметрии молекулы аммиака.
60. Постройте квадрат Кэли для группы C_{2v}
61. Охарактеризуйте преобразование р-орбиталей при операциях симметрии группы C_{2v}
62. Охарактеризуйте преобразование d-орбиталей при операциях симметрии группы C_{2v}
63. Определите характеры неприводимых представлений группы C_{2v} в базисе р-орбиталей.
64. Определите характеры неприводимых представлений группы C_{2v} в базисе d-орбиталей.
65. Чему равно число неприводимых представлений группы?
66. Приведите примеры молекул с группой симметрии D_{3h}
67. Приведите примеры молекул с группой симметрии D_{5h}
68. Приведите примеры аморфных веществ.
69. Какие свойства являются необходимым признаком кристалла?
70. Какие теории строения жидкости Вам известны?
71. Дайте определение термину «Молярная рефракция»
72. При каких обстоятельствах были открыты мезоморфные свойства веществ?
73. Какую форму молекул имели жидкокристаллические вещества, открытые Рейнитцером?
74. В чем разница между лиотропными и термотропными жидкокристаллическими веществами?
75. В литературе распространен термин «дискотики», что он обозначает?
76. В каких целях используется явление экзальтации рефракции?
77. Что понимают под термином «жидкокристаллическое термопкывало»?

Задания

При 293К плотность а%-го раствора вещества А в воде равна d г/см³, показатель преломления n . Вычислите молярную рефракцию вещества а, если для воды плотность составляет 1,000г/см³, а показатель преломления – 1,333.

| № | а% | Вещество А | d | n |
|-----|--------|---|-------|-------|
| 78. | 31,000 | HCl | 1,157 | 1,407 |
| 79. | 30,000 | H ₂ SO ₄ | 1,220 | 1,370 |
| 80. | 40,012 | HClO ₃ | 1,293 | 1,367 |
| 81. | 17,034 | LiBr | 1,129 | 1,362 |
| 82. | 35,002 | LiCl | 1,174 | 1,414 |
| 83. | 24,501 | NaCl | 1,187 | 1,377 |
| 84. | 12,505 | Na ₂ SO ₄ | 1,116 | 1,352 |
| 85. | 9,0401 | K ₂ SO ₄ | 1,075 | 1,345 |
| 86. | 44,012 | C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁ | 1,191 | 1,406 |
| 87. | 44,023 | CO(NH ₂) ₂ | 1,121 | 1,400 |

88. Дипольный момент. Полярные и неполярные вещества.
89. Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов.
90. Магнитный момент и магнитная восприимчивость веществ.
91. Методы ЭПР и ЯМР.
92. Электронные, колебательные и вращательные уровни энергии.
93. Молекулярные спектры. Правила отбора.
94. Энергетические критерии существования молекул.
95. Дисперсионное, ориентационное и индукционное взаимодействие.
96. Энергия химических связей и методы её определения.
97. Эксимеры и эксиплексы.
98. Теория кристаллического поля.
99. Спектрохимический ряд.
100. Теорема Яна-Теллера.

Перечень компетенций (части компетенции), проверяемых оценочным средством

| № | Код контролируемой компетенции | № вопросов и заданий |
|---|--------------------------------|----------------------|
| 1 | ОПК-4 | 1 – 100 |

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций

Критерии оценивания результатов устного опроса

| Критерий | Оценка | Уровень |
|---|------------|----------------|
| Студент успешно отвечает как на основные, так и на дополнительные вопросы по теоретическим основам дисциплины и по вопросам ее практического приложения для решения задач, возникающих при изучении структуры вещества. | зачтено | пороговый |
| Студент испытывает затруднения при ответах на теоретические вопросы и не способен использовать теоретические знания для решения практических задач, возникающих при изучении структуры вещества. | не зачтено | не сформирован |

Критерии оценивания реферата

| Критерий | Оценка | Уровень |
|---|------------|----------------|
| При подготовке реферата использованы как средства Интернет-порталов, так и анализ периодической научной литературы в области теории строения вещества, имеющейся в библиотеках и электронных библиотечных системах. Проанализирован материал монографий по теме реферата. Работа аккуратно оформлена, список литературы составлен в соответствии со стандартом. | зачтено | пороговый |
| Представленный материал изложен в стандартной учебной литературе. Дополнительная и периодическая литература не использована. Список литературы оформлен с серьёзными погрешностями. | не зачтено | не сформирован |

Методические рекомендации к сдаче зачета

Студенты обязаны сдать зачет в соответствии с расписанием и учебным планом.

Зачет является формой контроля усвоения студентом учебной программы по дисциплине или ее части, выполнения практических и реферативных работ.

Результаты сдачи зачета по дисциплине «Строение вещества» должны оцениваться как итог деятельности студента в семестре, а именно – по посещаемости лекций, результатам работы на практических занятиях, выполнению самостоятельной работы. При этом допускается на очной форме обучения пропуск не более 20% занятий, с обязательной отработкой пропущенных семинаров. Студенты, у которых количество пропусков превышает установленную норму, не выполнившие все виды работ и неудовлетворительно работавшие в течение семестра, проходят собеседование с преподавателем, который опрашивает студентов по темам учебного курса.

| Критерий | Оценка | Уровень |
|--|------------|----------------|
| Студент не имеет большого количества пропущенных занятий (более 20%), а при выполнении заданий в области теории строения вещества, направленных на контроль освоения компетенций, указанных в РПД, он показал знания, необходимые для решения поставленной задачи. Выполненные квантовомеханические расчеты базируются на глубоком знании соответствующих разделов математики, их результаты не имеют значительных погрешностей, а выводы соответствуют полученным результатам. При ответах на дополнительные вопросы студент не испытывает затруднений и способен сформулировать четкие однозначные ответы. | зачтено | пороговый |
| Студент имеет значительное количество пропущенных занятий, а при выполнении заданий в области теории строения вещества, направленных на контроль освоения компетенций, указанных в РПД, он не показал знаний, необходимых для решения поставленной задачи. Расчеты выполнены со значительными погрешностями, а выводы не соответствуют полученным результатам. При ответах на дополнительные вопросы студент испытывает значительные затруднения и не способен сформулировать четких однозначных ответов. | не зачтено | не сформирован |

5. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

5.1 Основная литература:

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон. – 4-е изд. (эл.) - М.: Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5-00101-502-4. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/94104#book_name
2. Камышов, В.М. Строение вещества [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. - 2-е изд., испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2017. - 236 с. - <https://e.lanbook.com/book/90007#authors>.

Для освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья используются специальные сервисы в электронно-библиотечных системах (ЭБС), доступ к которым организует Научная библиотека КубГУ.

5.2 Дополнительная литература:

1. Сизова, О.В. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / О.В. Сизова, Н.В. Иванова, А.А. Ванин. - Изд. 2-е, перераб. и доп. – СПб.: Издательство «Лань», 2016. - 276 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-2173-2. – Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/76285#book_name
2. Минкин, В.И. Теория строения молекул [Текст] : учебное пособие для студентов вузов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 558 с. - (Учебники и учебные пособия). - Библиогр. в конце гл. - ISBN 5222001067

5.3 Периодические издания:

1. Журнал общей химии
2. Журнал неорганической химии
3. Журнал физической химии

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. Интернет сайты ведущих государственных ВУЗов и научных организаций РФ: МГУ, СПбГУ, РХТУ, НГУ, КубГУ, РАН РФ и др.
2. Российское образование, федеральный портал – URL:<http://www.edu.ru>
3. Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.
4. Химический редактор ChemSketch: <http://www.acdlabs.com>
5. www.humuk.ru
6. Электронная библиотечная система «Лань» (<https://e.lanbook.com>)

6. Методические указания для обучающихся по дисциплине

По курсу «Строение вещества» предусмотрено проведение аудиторных занятий в форме лекций и практических занятий. Лекция предполагает передачу в структурированной форме систематизированной информации большого объема. Посещение и конспектирование лекции студентами способствует формированию общих подходов и принципов усвоения содержания данной дисциплины, содействует активизации мышления, нацеливает на дальнейшую самостоятельную познавательную деятельность. Рекомендуются конспектировать лекции по принципу выделения опорных пунктов той или иной темы, что позволит в дальнейшем углублять полученные на лекциях знания при помощи дополнительных источников информации. Разделы лекций, которые

вызывают затруднения, могут быть обсуждены в форме вопросов, заданных после лекции, или в ходе консультаций.

Практические занятия, в ходе которых проводится краткий опрос студентов и обсуждение вопросов изучаемой темы, способствуют лучшему усвоению теоретического материала. При подготовке к практическим занятиям рекомендуется на первом этапе тщательно проработать конспекты лекций. В случае возникновения вопросов по теоретическим проблемам математических основ квантовомеханического описания теории строения вещества рекомендуется повторить соответствующие разделы курса математики.

Важнейшим этапом освоения дисциплины является самостоятельная работа. В процессе подготовки рефератов студенты сочетают самостоятельную индивидуальную и групповую работу, что является важнейшим этапом освоения дисциплины. При подготовке рефератов рекомендуется составить подробный план, который предусматривает изучение как основной учебной, так и дополнительной научной литературы. В ходе подготовки следует использовать как традиционные источники информации, так и электронные библиотечные системы. Иллюстративный материал готовится в виде презентации, которая должна отражать основное содержание каждого раздела реферата. Список использованных литературных источников составляется в соответствии с существующими нормами библиографического описания.

| № | Наименование раздела | Формы самостоятельной работы | Формы отчетности |
|---|--|--|------------------|
| 1 | Квантовомеханическая теория строения вещества | Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к практическим занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet. | У |
| 2 | Симметрия молекул | Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к практическим занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet. | У |
| 3 | Энергетические аспекты строения молекул. Электрические и магнитные свойства веществ | Самостоятельное изучение разделов. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet. Подготовка реферата с использованием учебной и современной научной литературы. | Р |
| 4 | Строение вещества в конденсированном состоянии | Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к практическим занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet. | У |

В освоении дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья большое значение имеет индивидуальная учебная работа (консультации) – дополнительное разъяснение учебного материала.

Индивидуальные консультации по предмету являются важным фактором, способствующим индивидуализации обучения и установлению воспитательного контакта между преподавателем и обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья.

7. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

7.1 Перечень информационно-коммуникационных технологий

В качестве информационно-коммуникационных технологий в соответствии с рекомендациями ИИТО-2012 используются:

1. Базы данных сети «Интернет»

2. Электронные таблицы
3. Презентации
4. Электронная документация

7.2 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

При выполнении расчетных задач и работе над рефератами используется следующее программное обеспечение: Microsoft Office (Word, Excel), ACD Labs Chems sketch, Компьютерная программа Hyper Chemistry.

7.3 Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

1. КонсультантПлюс: <http://www.consultant.ru>
2. Федеральный центр информационно-образовательных ресурсов. URL: <http://fcior.edu.ru>.
3. Российский образовательный портал. URL: <http://www.school.edu.ru>.

Рекомендуется также использовать современные базы профессиональных данных.

8. Материально-техническое обеспечение по дисциплине (модулю)

Для материально-технического обеспечения дисциплины «Строение вещества» используется меловая доска и учебно-научная аппаратура (интерактивная доска, ноутбук, мультимедийный проектор).

Для решения поставленных задач требуется также ПЭВМ уровня не ниже Pentium IV с операционной системой Windows XP / 7 / 10, компьютерная программа Hyper Chemistry.

| № | Вид работ | Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля) и оснащенность |
|---|------------------------|---|
| 1 | Лекционные занятия | Лекционная аудитория, аудитория для проведения семинарских занятий, групповых и индивидуальных консультаций, промежуточной аттестации типа ауд. 234С, снабженная комплектом учебной мебели, интерактивной доской, меловой доской, интерактивным проектором и ноутбуком. |
| 2 | Семинарские занятия | Лекционная аудитория, учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (ауд. 416С), снабженная комплектом учебной мебели, интерактивной доской, меловой доской, интерактивным проектором и ноутбуком. |
| 3 | Самостоятельная работа | Читальный зал КубГУ, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», программой экранного увеличения и обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета; Учебные аудитории для самостоятельной работы обучающихся и курсового проектирования, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет»: ауд. 431С, 433С, 428С, 443С. |