

Министерство образования и науки 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

Хагуров Т.А.

подпись

« 27 »  2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Б1.В.05 СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА**

Направление подготовки – 04.03.01 Химия

Направленность/профиль – Аналитическая химия

Программа подготовки – прикладная

Форма обучения – очная

Квалификация выпускника – бакалавр

Краснодар 2018

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. Зеленов, доцент, кандидат химических наук



Рабочая программа дисциплины «Строение вещества» утверждена на заседании кафедры общей, неорганической химии и ИВТ в химии протокол № 8 «10» апреля 2018 г.

Заведующий кафедрой (разработчика) Буков Н.Н.



Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры аналитической химии протокол № 5 «19» апреля 2018 г.

Заведующий кафедрой (выпускающей) Темердашев З.А.



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

протокол № 5 «20» апреля 2018 г.

Председатель УМК факультета Стороженко Т.П.



Рецензенты:

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

Шабанова И.В., канд. хим. наук, доцент кафедры химии факультета агрохимии и защиты растений ФГБОУ ВО «КубГАУ»

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель 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.

### 1.2 Задачи дисциплины

- Владение 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 «Строение вещества» относится к дисциплинам вариативной части блока 1 учебного плана.

Для освоения данной дисциплины необходимы знания по курсам «Физика», «Математика», «Неорганическая химия». Знания, полученные в процессе изучения данной дисциплины, необходимы для успешного изучения курсов «Органическая химия», «Физическая химия», «Химия координационных соединений».

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

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование компетенций ПК-3; ОПК-1

| № п.п. | Индекс компетенции | Содержание компетенции (или её части)                 | В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны   |   |  |
|--------|--------------------|---|---|---|--|
|        |                    |   | знать   | уметь   | владеть  |
| 1.     | ПК-3               | Владением системой фундаментальных химических понятий | - Базовые положения квантовой механики и основные математические законы, необходимые для их интерпретации;<br>- Основные положения теории симметрии молекул;<br>- Методы описания структуры и свойств вещества с точки зрения современной теоретической химии | - Применять теоретические знания для решения практических задач в области описания свойств веществ, их энергетических характеристик и структуры | Методами интерпретации экспериментальных данных на основе квантовомеханической теории строения вещества;<br>- Основными методами расчета энергетических параметров молекул и описания их реакционной способности |

|    |       |  |   |  |  |
|----|-------|--|---|--|--|
| 2. | ОПК-1 | Способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальной химии при решении профессиональных задач | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Базовые законы квантовой механики</li> <li>- Основные разделы математической теории, необходимые для квантового моделирования;</li> <li>- Способы использования основных теорий в области строения вещества для описания химических процессов</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Пользоваться приемами современной математической науки для решения задач, возникающих в ходе анализа химических проблем;</li> <li>- Использовать теоретические положения и расчетные значения параметров, характеризующих структуру и реакционную способность веществ, для решения конкретных профессиональных задач</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>- Способами использования базовых разделов современной математики для анализа проблем описания структуры и реакционной способности веществ;</li> <li>- Методами применения полученных теоретических результатов для практического использования в области прогнозирования реакционной способности вещества и его структуры</li> </ul> |
|----|-------|--|---|--|--|

## 2. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 2.1 Распределение трудоёмкости дисциплины по видам работ

| Вид работы                                   | Всего часов                   | Семестр (часы) |      |   |   |
|--|-------------------------------|----------------|------|---|---|
|  |                               | 5              | 6    | 7 |   |
| <b>Контактная работа, в том числе:</b>       |                               |                |      |   |   |
| <b>Аудиторные занятия, всего</b>             |                               |                |      |   |   |
| Занятия лекционного типа                     | 18                            | 18             | -    | - |   |
| Лабораторные занятия                         |                               |                |      |   |   |
| Занятия семинарского типа                    | 34                            | 34             |      |   |   |
| <b>Иная контактная работа:</b>               |                               |                | -    | - |   |
| Контролируемая самостоятельная работа (КСР)  | 4                             | 4              | -    | - |   |
| Промежуточная аттестация (ИКР)               | 0,2                           | 0,2            | -    | - |   |
| <b>Самостоятельная работа в том числе:</b>   |                               |                | -    | - |   |
| Курсовая работа                              | -                             | -              | -    | - |   |
| Проработка учебного теоретического материала | 41,8                          | 41,8           |      |   |   |
| Выполнение индивидуальных заданий            | -                             | -              | -    | - |   |
| Реферат                                      | 10                            | 10             | -    | - |   |
| <b>Подготовка к текущему контролю</b>        | -                             | -              | -    | - |   |
| <b>Контроль</b>                              |                               |                | -    | - |   |
| <b>Подготовка к экзамену</b>                 | -                             | -              | -    | - |   |
| <b>Общая трудоемкость</b>                    | Часов                         | 108            | 108  | - | - |
|  | В том числе контактной работы | 56,2           | 56,2 | - | - |
|  | Зачётных единиц               | 3              | 3    | - | - |

## 2.2 Структура дисциплины

Основные разделы дисциплины:

| №     | Наименование разделов(тем)  | Кол-во часов |                   |    |    |                      |
|-------|---|--------------|-------------------|----|----|----------------------|
|       |   | всего        | Аудиторная работа |    |    | Внеаудиторная работа |
|       |   |              | Л                 | ПЗ | ЛР |                      |
| 1     | 2   | 3            | 4                 | 5  | 6  | 7                    |
| 1     | Квантовомеханическая теория строения вещества                                       | 28           | 6                 | 10 | -  | 12                   |
| 2     | Симметрия молекул   | 22           | 4                 | 8  | -  | 10                   |
| 3     | Энергетические аспекты строения молекул. Электрические и магнитные свойства веществ | 31,8         | 4                 | 8  | -  | 19,8                 |
| 4     | Строение вещества в конденсированном состоянии                                      | 22           | 4                 | 8  | -  | 10                   |
| Итого |   | 103,8        | 18                | 34 |    | 51,8                 |

## 2.3 Содержание разделов дисциплины

### 2.3.1 Занятия лекционного типа

| № п/п | Наименование раздела                           | Содержание раздела   | Форма текущего контроля |
|-------|--|--|-------------------------|
| 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>   | Устный опрос            |
| 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> | Устный опрос            |

|   |   |  |         |
|---|---|--|---------|
| 3 | <p>Энергетические аспекты теории строения вещества.</p> <p>Электрические и магнитные свойства веществ</p> | <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> <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.</p> <p>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. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов как основа интерпретации спектров комплексных соединений. Правила отбора.</p> <p>Значение молекулярных спектров для решения практических задач химической науки.</p> | Реферат |
|---|---|--|---------|

|   |  |  |              |
|---|--|--|--------------|
| 4 | Строение вещества в конденсированном состоянии | Структурная классификация конденсированных фаз. Диаграммы состояния. Мгновенная колебательно-усредненная структура жидкостей. Современные способы описания структуры жидкостей. Аморфные вещества. Жидкие кристаллы (холестерики, нематики и пр.). Идеальные кристаллы. Особенности ультрадисперсного состояния веществ. Структура границы раздела конденсированных фаз. | Устный опрос |
|---|--|--|--------------|

### 2.3.2 Занятия семинарского типа

| № | Наименование раздела  | Тематика практических занятий семинаров   | Форма текущего контроля |
|---|---|---|-------------------------|
| 1 | Квантово-механическая теория строения вещества  | Математический аппарат квантовой химии. Операторы, собственные функции и собственные значения. Основные постулаты квантовой химии. Уравнение Шредингера<br>Задачи о свободном движении частицы, движении частицы в потенциальном ящике.<br>Эмпирические и полуэмпирические методы в квантовой химии.  | Устный опрос            |
| 2 | Симметрия молекул   | Симметрия равновесной геометрической конфигурации молекулы. Элементы симметрии. Операции симметрии. Точечные группы симметрии. Приводимые и неприводимые представления.   | Устный опрос            |
| 3 | Энергетические аспекты теории строения вещества. Электрические и магнитные свойства веществ | Энергия образования молекулы.<br>Энергия стабилизации кристаллическим полем как эффект влияния строения молекул на их свойства.<br>Электрический дипольный момент в классической теории и квантовой механике.<br>Парциальные моменты связей и структурных групп. Векторно-аддитивная схема расчета дипольных моментов.<br>Связь молекулярных постоянных – дипольного момента и поляризуемости – с макроскопическими характеристиками вещества.<br>Молярная рефракция. Эмпирическая схема расчета рефракций.<br>Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекулы. Состояние молекул в магнитном поле. Диамагнитные и парамагнитные вещества. Ферромагнетизм.<br>ЯМР-спектроскопия. Условия ядерного магнитного резонанса. Химический сдвиг. Релаксационные явления. Шифт-реагенты | Реферат                 |

|   |  |  |              |
|---|--|--|--------------|
|   |  | <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. Правила отбора.</p> <p>Значение молекулярных спектров для решения практических задач химической науки.</p> |              |
| 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>  | Устный опрос |

### 2.3.3 Лабораторные занятия

Не предусмотрены

### 2.3.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов)

Не планируется в соответствии с учебным графиком.

### 2.4 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

| № | Наименование раздела                           | Перечень учебно-методического обеспечения  |
|---|--|--|
| 1 | Квантово-механическая теория строения вещества | <p>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: <a href="https://e.lanbook.com/book/94104#book_name">https://e.lanbook.com/book/94104#book_name</a></p>  |
| 2 | Симметрия молекул                              | <p>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: <a href="https://e.lanbook.com/book/94104#book_name">https://e.lanbook.com/book/94104#book_name</a></p> <p>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: <a href="https://e.lanbook.com/book/76285#book_name">https://e.lanbook.com/book/76285#book_name</a></p> |



|   |  |   |
|---|--|---|
|   |  | 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  |
| 3 | Энергетические аспекты теории строения вещества.<br>Электрические и магнитные свойства веществ | 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. - <a href="https://e.lanbook.com/book/90007#authors">https://e.lanbook.com/book/90007#authors</a> .<br>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  |
| 4 | Строение вещества в конденсированном состоянии   | 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: <a href="https://e.lanbook.com/book/94104#book_name">https://e.lanbook.com/book/94104#book_name</a><br>Методические рекомендации к организации аудиторной и внеаудиторной (самостоятельной) работы студентов: методические указания / сост. Т.П. Стороженко, Т.Б. Починок, А.В. Беспалов, Н.В. Лоза. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. – 89 с. |

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 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

Текущий контроль осуществляется в устной и письменной форме в процессе практических занятий при проведении коллоквиумов, при подготовке и участии в обсуждении рефератов и решении задач. Промежуточный контроль осуществляется приемом зачета в 4 семестре.

#### 4.1 Фонд оценочных средств для проведения текущей аттестации

(в полном объеме ФОС по дисциплине «Строение вещества» оформлен как приложение к программе)

##### 4.1.1 Примеры упражнений и задач, рассматриваемых на занятиях

1. Коммутируют ли операторы  $A$  и  $B$  если  $A = x$ ;  $B = y$ ?
2. Линеен ли оператор  $A = x^2$ ?
3. Докажите линейность оператора  $d/dx$
4. Докажите, что оператор  $d/dx$  линеен и эрмитов.
5. Удовлетворяет ли функция  $\exp(ax)$  уравнению  $Lf = Lf$ , если  $L = d^2/dx^2$ ?
6. Оцените коэффициент прозрачности потенциального барьера, если:  $D_0 \approx 1$ ,  $U_0 - E = 10^{-18}$  Дж,  $\mu = 10^{-30}$  кг,  $l = 10^{-10}$  м
7. В рамках JJ-связи установите термы для электронной конфигурации  $sp$ .
8. Установите все возможные термы для системы из двух  $p$ -электронов, выберите на основании известных Вам правил основной терм (используйте схему Рассела-Саундерса)
9. Определите константу экранирования  $S$  для АО  $1s, 2p, 3p$  атома хлора.
10. Определите эффективный заряд ядра для  $6s$  электрона атома гадолиния
11. Используя МОХ постройте диаграмму энергетических уровней  $\pi$ -МО и схемы их заполнения электронами для циклопропенильной системы (случаи катиона, радикала и аниона).
12. Используя графический метод Фроста, определите энергетические уровни циклопентадиенила и бензола
13. При 293К плотность  $a\%$  раствора вещества  $A$  в воде равна  $d$  г/см<sup>3</sup>, показатель преломления  $n$ . Вычислите молярную рефракцию вещества  $a$ , если для воды плотность 1,000 г/см<sup>3</sup>, а показатель преломления – 1,333.

| №   | $a\%$  | Вещество $A$                                    | $d$   | $n$   |
|-----|--------|---|-------|-------|
| 14. | 31,000 | HCl   | 1,157 | 1,407 |
| 15. | 30,000 | H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>                  | 1,220 | 1,370 |
| 16. | 40,012 | HClO <sub>3</sub>                               | 1,293 | 1,367 |
| 17. | 17,034 | LiBr  | 1,129 | 1,362 |
| 18. | 35,002 | LiCl  | 1,174 | 1,414 |
| 19. | 24,501 | NaCl  | 1,187 | 1,377 |
| 20. | 12,505 | Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>                 | 1,116 | 1,352 |
| 21. | 9,0401 | K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>                  | 1,075 | 1,345 |
| 22. | 44,012 | C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub> | 1,191 | 1,406 |
| 23. | 44,023 | CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>               | 1,121 | 1,400 |

##### 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 |

##### 4.1.2 Примерные темы рефератов

1. Силы Ван-дер-Ваальса
2. Раман-спектроскопия и её применение в исследовании химических веществ
3. Спектры люминесценции

4. Магнитная восприимчивость веществ. Ферромагнетизм. Антиферромагнетизм. Ферромагнетики.
5. Молекулярные магниты и перспективы их использования
6. Ориентационное и дисперсионное взаимодействия и их влияние на свойства веществ
7. Методы определения дипольных моментов химических соединений.
8. ЭПР-спектроскопия и её применение к решению структурно-химических задач
9. Энергия химических связей и методы её определения.
10. Эксимеры и эксиплексы
11. Спектроскопия ЯМР-высокого разрешения в исследовании структуры органических веществ
12. ИК-спектроскопия. Применение ИК-спектров в качественном и количественном анализе.
13. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса.

#### **Критерии оценивания реферата**

| <b>Критерий</b>   | <b>Оценка</b> | <b>Уровень</b>    |
|---|---------------|-------------------|
| 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<br>зачтено | не<br>сформирован |

#### **4.2 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации**

##### **Вопросы и задания для проведения промежуточной аттестации в форме зачета**

1. В чём заключается разница понятий функция, функционал, оператор?
2. Сформулируйте понятие коммутатор 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 квантово-механических 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 Пфёндаопределения 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. Ароматичность и антиароматичность
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  $i d/dx$  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 p-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  $\pi$ -МО и схемы их заполнения электронами для циклопропенильной системы (случаи катиона, радикала и аниона).
42. Используя графический метод Фроста определите энергетические уровни циклопентади-енила 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 симметрия молекулы аммиака.
60. Постройте квадрат Кэли для группы  $C_{2v}$
61. Охарактеризуйте преобразование p-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 p-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 экзальтация рефракции?
77. Что понимают под термином «жидкокристаллическое термопокрывало»?

Задание: При 293К плотность  $a\%$  раствора вещества А в воде равна  $d$  г/см<sup>3</sup>, показатель преломления  $n$ . Вычислите молярную рефракцию вещества а, если для воды плотность 1,000 г/см<sup>3</sup>, а показатель преломления – 1,333.

| №   | a%     | Вещество А                                      | d     | n     |
|-----|--------|---|-------|-------|
| 78. | 31,000 | HCl   | 1,157 | 1,407 |
| 79. | 30,000 | H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>                  | 1,220 | 1,370 |
| 80. | 40,012 | HClO <sub>3</sub>                               | 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 <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>                 | 1,116 | 1,352 |
| 85. | 9,0401 | K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>                  | 1,075 | 1,345 |
| 86. | 44,012 | C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub> | 1,191 | 1,406 |
| 87. | 44,023 | CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>               | 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

#### Критерии оценки:

| 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 неспособен сформулировать четких однозначных ответов. | не<br>зачтено | не<br>сформирован |
|--|---------------|-------------------|

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.

## 5. Перечень основной и дополнительной литературы

### 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](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>.

### 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](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

### 6. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

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](http://www.humuk.ru)
6. Электронная библиотечная система «Лань» (<https://e.lanbook.com>)

### 7. 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. Практические занятия, в ходе которых проводится краткий опрос студентов и обсуждение вопросов изучаемой темы, способствуют лучшему усвоению теоретического материала.

Важнейшим этапом освоения дисциплины является самостоятельная работа. В процессе подготовки рефератов студенты сочетают самостоятельную индивидуальную и групповую работу, что является важнейшим этапом освоения дисциплины.

| № | 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.  | УО               |
| 2 | Симметрия молекул   | Самостоятельное изучение разделов. Подготовка к практическим занятиям. Работа с учебной литературой, базами данных в сети Internet.  | УО               |
| 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.  | УО               |

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

### 8.1 Перечень необходимого 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.

### 8.2 Перечень необходимых 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.

## 9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса 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, аудитория для проведения семинарских занятий, 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.<br><br>Учебные аудитории, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет»: ауд. 431С, 433С, 428С, 443С. |