


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО ВГУ)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
физической химии



О.А.Козадеров
20.04.2020

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.О.20 Строение вещества

- 1. Код и наименование специальности:** 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
- 2. Профиль подготовки / специализация:** Фундаментальная химия в профессиональном образовании
- 3. Квалификация выпускника:** Химик. Преподаватель химии
- 4. Форма обучения:** очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** кафедра физической химии
- 6. Составители программы:** Соцкая Надежда Васильевна, к.х.н., доцент
- 7. Рекомендована:** научно - методическим Советом химического факультета от 19.03.2020 протокол № 3
- 8. Учебный год:** 2022 / 2023 **Семестр:** 6

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Целью освоения учебной дисциплины является: изучение современных представлений о строении вещества на субатомном, атомном, молекулярном уровнях, а также на уровне макроскопических тел (полимеры, кристаллы).

Задачи учебной дисциплины:

- ознакомление с современной точкой зрения о возникновении Вселенной, вещества во Вселенной;
- рассмотрение различных уровней организации материи – от элементарных частиц до макроскопических тел;
- приложение законов квантовой механики к молекулярным системам различной степени сложности; приобретение навыков интерпретации выводов квантово-механического рассмотрения химических объектов; знакомство с квантово-механической теорией химического строения и квантовыми аналогами понятий классической теории химического строения: химическая связь, валентность, кратность связи и др.;
- изучение фундаментальных положений учения о симметрии молекул;
- раскрытие связей между электронным строением химических соединений и их физическими свойствами;
- раскрытие связей между электронным строением химических соединений и их реакционной способностью.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Вариативная часть блока 1. Обязательная дисциплина.

Уметь дифференцировать и интегрировать элементарные функции, знать специальные интегралы, основы квантовой механики, квантовой химии, молекулярной физики и классической термодинамики, применять знания о строении молекул

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ОПК-1	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	ОПК-1.1	Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Знать фундаментальные положения учения о строении и симметрии молекул, уметь их использовать для результатов расчета электронного строения молекулярных систем различной сложности. Владеть основными навыками интерпретации выводов квантово-механического описания строения химических систем, раскрытия связей между их электронным строением и реакционной способностью. Уметь формулировать выводы по результатам анализа литературных данных и собственных расчетно-теоретических результатов в
		ОПК-1.2	Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с	

			использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	раскрытия связей между электронным строением исследуемых систем и их реакционной способностью.
		ОПК-1.3	Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.	ОПК-3.1	Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	Знать основные теоретические и полуэмпирические модели, описывающие электронное строение молекул и применять при оценке реакционной способности веществ. Уметь использовать стандартное программное обеспечение для решения квантово-химических задач и оценке реакционной способности молекул
		ОПК-3.2	Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. — 4/144

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/часах в соответствии с учебным планом — 4 / 144.

Форма промежуточной аттестации **ЭКЗАМЕН**

13. Виды учебной работы:

Вид учебной работы	Трудоемкость (часы)				
	Всего	В том числе в интерактивной форме	По семестрам		
			6	x	x
Аудиторные занятия	72		72		
в том числе:					
лекции	36		36		
практические	-		-		
лабораторные	36		36		
Самостоятельная работа	36		36		
Форма промежуточной аттестации Экзамен	36		36		
Итого	144		144		

13.1 Содержание дисциплины:

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1. Лекции			
1.1	Введение. Уровни организации материи.	Содержание понятий «строение вещества» и «структура вещества». Различные аспекты термина «строение молекул»: топологический, геометрический, электронный и др. Упорядоченные и неупорядоченные структуры конденсированных фаз. Общий обзор методов экспериментального и теоретического изучения строения веществ. Формы существования материи на разных уровнях организации. Элементарные частицы. Принципы классификации. Фундаментальные силы в природе. Вещество во Вселенной, его виды. Эволюция вещества во Вселенной. Химическое вещество.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995
1.2	Основы классической теории химического строения	Основные положения классической теории химического строения. Молекулярные модели разного уровня в современной теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Величины, определяющие геометрическую конфигурацию молекулы: валентные углы, межъядерные расстояния, углы внутреннего вращения. Феноменологическая модель молекулы. Валентные и невалентные взаимодействия. Химическое строение. Классическая теория валентности	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995
1.3	Квантово-механическая интерпретация основных представлений теории химического строения молекул	Квантовая теория химического строения. Возможности квантово-механического аппарата в исследовании молекулярной структуры. Молекулярное уравнение Шредингера. Электронные, колебательные и вращательные состояния. Адиабатическое приближение. Потенциальные функции молекул и ее составляющие. Энергия диссоциации молекул. Энергия связи. Квантовый аналог химической связи. Обоснование валентного штриха. Кратность связи. Порядок связи. Теорема Гельмана – Фейнмана и критерий прочности связи. Возможность квантово-механической оценки полярности, дипольных моментов, силовых постоянных молекул, магнитных свойств и др.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995
1.4	Учение о симметрии молекул	Элементы и операции симметрии ядерной конфигурации молекулы. Точечные группы симметрии молекул. Классификация точечных групп. Представление группы. Разложение приводимых представлений на неприводимые. Характер представления. Таблицы характеров точечных групп. Классификация квантовых состояний молекул по симметрии. Преобразования симметрии гамильтониана и классификация уровней энергии квантовых систем. Симметрия и вырождение. Симметрия базисных орбиталей	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995

		Упрощение вековых уравнений методом теории групп. Групповые орбитали молекул. Правила построения молекулярных орбиталей, удовлетворяющих требованиям симметрии.	
1.5	Электронное строение некоторых молекул	<p>Основное и возбужденные состояния молекулы водорода. Связывающие и разрыхляющие орбитали. Синглетные и триплетные состояния. Электронное строение двухатомных молекул, образованных атомами 1 и 11 периодов. Классификация орбиталей по симметрии. Корреляционные диаграммы МО для двухатомных молекул. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах, образованных атомами второго периода. Полярность химической связи и ее характеристики.</p> <p>Концепция гибридизации в методах валентных связей и молекулярных орбиталей. Делокализованные (канонические) и локализованные орбитали. Обоснование валентного штриха. Одноэлектронные и коллективные свойства молекул (М.Дьюар). Молекулы с «дефицитом» электронов. Координационные соединения. Теория кристаллического поля. Анализ расщепления d-уровней в полях различной симметрии. Параметры расщепления. Сильное и слабое поле лигандов. Анализ электронных спектров и магнитных свойств на основе теории кристаллического поля. Теория поля лигандов. Групповые орбитали. Квантово-механическая трактовка химической связи в комплексах. Сопряженные π-электронные системы. Бутадиен. Бензол. Небензоидные ароматические соединения. Правила $4n$ и $4n+2$. Современные представления об ароматичности. Антиароматичность. Альтернантные углеводороды.</p>	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995
1.6	Сохранение орбитальной симметрии химических реакций	<p>Качественная теория реакционной способности органических соединений. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной и анионной делокализации.</p> <p>Квантово химическое описание элементарного акта химических реакций. Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности. Переходное состояние. Симметрия реагентов, переходного состояния и продуктов реакции. Качественный анализ возможных механизмов химических реакций на основе общей структуры потенциальной поверхности. Корреляционные правила Вудворда - Хофмана при анализе возможных механизмов химических реакций. Теория граничных орбиталей Фукуи.</p>	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995
2. Лабораторные занятия			
2.3	Квантово-механическая интерпретация основных представлений теории химического	Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменение при переходе от разделенных атомов к молекуле. Оператор Гамильтона для атомных и молекулярных систем. Построение электронной волновой функции в виде определителя. Расчет	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995

	строения молекул	молекулярного иона водорода по методу МО ЛКАО.	
2.4	Учение о симметрии молекул	Симметрия молекул. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии молекул. Неприводимые представления на примере групп C_{2v} и D_3 . Характеры представлений. Разложение приводимого представления на неприводимые. Использование таблиц характеров для построения симметризованных орбиталей. Использование таблиц характеров для решения других задач (для отбора орбиталей, имеющих ненулевое перекрытие, для вывода правил отбора для спектральных переходов, для расчета терма молекулы).	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995
2.5	Электронное строение некоторых молекул	МО двухатомных гомо- и гетероядерных молекул. Электронное строение некоторых многоатомных молекул: схемы образования МО, электронные конфигурации молекул. Интерпретация строения молекул. Интерпретация геометрического строения молекул на основе модели ОЭПВО, теории МО ЛКАО, концепции гибридизации атомных орбиталей. Электронное строение комплексов переходных металлов с неорганическими и органическими лигандами. Электронное строение сопряженных и ароматических систем. Примеры расчетов по методу Хюккеля. Заряды на атомах, порядки связей. Граничные орбитали.	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995
2.6	Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях	Корреляционные диаграммы и корреляционные правила при качественном описании механизмов химических реакций (правила Вудворда-Хофмана о сохранении орбитальной симметрии, теория граничных орбиталей Фукуи)	https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995

13.2 Разделы дисциплины и виды занятий:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Виды занятий (часов)				Всего
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	
1.	Введение. Уровни организации материи.	2		0	6	8
2.	Основы классической теории химического строения	2		0	10	12
3.	Квантово-механическая интерпретация основных представлений теории химического строения молекул	6		6	12	24
4.	Учение о симметрии молекул	8		10	16	34
5.	Электронное строение некоторых молекул	12		12	16	40
6.	Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях	6		8	12	26
	Итого	36		36	72	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Составление конспектов. Самостоятельное изучение отдельных тем. Выполнение домашних заданий. Подготовка к лабораторным занятиям. Подготовка к текущей и промежуточной аттестации.

При реализации дисциплины с использованием дистанционных образовательных технологий используются инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), сервисы видеоконференций (BigBlueButton, Zoom, Discord и др.), электронная почта, мессенджеры и соцсети.»

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1.	Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Часть 1. / Н.Ф. Степанов. – М.: Издательство Юрайт, 2018. – 233 с.
2	Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Часть 2. / Н.Ф. Степанов. – М.: Издательство Юрайт, 2018. – 283 с.
3.	Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия / А.И.Ермаков - М. : Издательство Юрайт, 2010. - 555 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4.	Грибов Л.А. Элементы квантовой теории строения и свойств молекул / Л.А. Грибов. — Долгопрудный : Интеллект, 2010. — 310 с.
4.	Стромберг А.Г. Физическая химия: учеб для вузов / А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко - М. : Высш. шк., 2009. - 526 с.
5.	Минкин В.И. Теория строения молекул /В.И.Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. – Ростов-н/Д: Феникс, 1997. – 560 с.
6.	Симкин Б.Я. Задачи по теории строения молекул / Б.Я. Симкин, М.Е. Клецкий, М.Н. Глуховцев. – Ростов-н/Д: Феникс, 1997. – 272 с.
7.	Горбачев В.В. Концепции современного естествознания / В.В. Горбачев. – М.: Оникс 21 век: Мир и образование, 2003. – 590 с.
8.	Краснов К.С. Молекулы и химическая связь / К.С. Краснов. – М.: Высш. Шк., 1984 – 280 с.
9.	Татевский В.М. Строение молекул / В.М. Татевский. . – М.: Химия, 1977. – 511 с.
10.	Папулов Ю.Г. Строение молекул / Ю.Г. Папулов. – Тверь: Изд-во Твер. Гос. Ун-та, 1995. – 199 с.
12.	Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений / И.Б. Берсукер. – Л.: Химия, 1986. – 286 с.
15.	Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии / Ю.А.Пентин, Л.В. Вилков. – М.: Мир, АСТ, 2003. – 683 с.
18.	Корольков Д.В. Основы теоретической химии : Учебное пособие / Д.В. Корольков, Г.А. Скоробогатов. — М. : Academia, 2004. — 346 с.
19.	Бердетт Дж. Химическая связь./ Дж. Бердетт. – М.: Мир: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 245 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
20.	Зональная научная библиотека www.lib.vsu.ru
21.	Интернет портал для химиков http://www.chemweb.com
22.	Интернет-ресурсы - библиотека http://www.twirpx.com
23.	Портал научно-технической информации ЭБ Нефть и Газ 2007 www.nglib.ru
24.	Интернет портал образовательных ресурсов http://window.edu.ru

25.	ЭУМК «Строение вещества 3 к» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2217
-----	--

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
19.	Зональная научная библиотека www.lib.vsu.ru
20.	Интернет портал для химиков http://www.chemweb.com
21.	Интернет-ресурсы - библиотека http://www.twirpx.com
22.	Портал научно-технической информации ЭБ Нефть и Газ 2007 www.nglib.ru
23.	Интернет портал образовательных ресурсов http://window.edu.ru
25.	ЭУМК «Строение вещества 3 к» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=3995

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Экспериментальные основы квантовой механики : учеб. пособие. Специальность 020101 (011000) - Химия / В.Ю. Кондрашин [и др.] .— Воронеж : ЛОП ВГУ, 2005 .— 50 с.

17. Образовательные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

Проведение вводной и обзорных лекций, решение задач по основным разделам курса. Подготовка к текущей и промежуточной аттестации с использованием рекомендуемой литературы

При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения и различные дистанционные образовательные технологии, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>) и/или «МООК ВГУ» (<https://mooc.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций (в том числе с применением сервисов Zoom, Discord и др.), взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Учебники, учебные пособия, задачки, мульти-медиа техника.

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Введение. Уровни организации материи.	ОПК-3	ОПК-3.1	Практическое задание
2.	Основы классической теории химического	ОПК-1	ОПК-1.1-1.3 ОПК-3.2	Практическое задание

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
	строения			
3.	Квантово-механическая интерпретация основных представлений теории химического строения молекул	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.3 ОПК-3.1	Контрольная работа
4.	Учение о симметрии молекул	ОПК-1	ОПК-1.1-1-3	Практическое задание
5.	Электронное строение некоторых молекул	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.1-1.2 ОПК-3.1	Контрольная работа
6.	Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях	ОПК-3	ОПК-3.1	Практическое задание
Промежуточная аттестация форма контроля - экзамен				Перечень вопросов Практическое задание

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

20.1.1 Перечень практических заданий

1. Каков физический смысл квадрата волновой функции?
2. Дайте определение атомной и молекулярной орбитали.
3. Предложите алгоритм исследования атомной орбитали.
4. Используя правило Хунда, найдите наиболее устойчивый терм атома.
5. В задаче об H_2^+ фигурирует важное для строения молекул понятие интеграла перекрывания. Каков его геометрический смысл?
6. Каков физический смысл кулоновского и обменного интегралов?
7. Какие МО называют связывающими, разрыхляющими и несвязывающими.
8. Молекула H_2^+ содержит один электрон, молекула H_2 - два. Можно ли для построения МО в том и другом случае использовать один и тот же базис?
9. Какая МО называется симметричной, а какая - антисимметричной. Какое свойство орбиталей лежит в основе такой классификации?
10. МО молекулы водорода классифицируются на σ и π МО. Какое свойство положено в основу такой классификации?
11. Опираясь на электронную конфигурацию двухатомной молекулы сравните энергии диссоциации молекулы и её ионах.
12. Опираясь на электронную конфигурацию двухатомной молекулы сравните длины связи в молекуле и её ионах.
13. Определите молекулярные термы молекулы, если известна электронная конфигурация молекулы.
14. Опираясь на теорию ОЭПВО, предскажите равновесную геометрическую конфигурацию молекул.
15. Симметрия молекул. Теоремы взаимодействия элементов симметрии
16. Методика определения точечных групп симметрии молекул
17. Поясните принцип образования гибридных орбиталей (ГАО) в методе МО.
18. Поясните принцип составления групповых орбиталей (ГО) в методе МО.
19. Поясните принцип составления симметризованных орбиталей.

20. Объясните смысл терминов делокализованные и локализованные молекулярные орбитали в методе МО.
21. Составьте волновые функции для молекул этилена и бутадиена в приближении метода молекулярных орбиталей Хюккеля.
22. Составьте, не решая -электронный Хюккелевский детерминант для молекулы бутадиена.
23. Опираясь на правила Фукуи, определите направление электрофильной атаки в молекуле, если известен вид высшей заполненной МО.
24. Опираясь на правила Фукуи, определите направление электрофильной атаки в молекуле, если известен вид низшей свободной МО
25. Пользуясь диаграммами Фроста, объясните, какие структуры пятичленного кольца C_nH_n будут обладать ароматическими свойствами?
26. Опираясь на теорию кристаллического поля, сравните магнитные моменты октаэдрических комплексов, если известны электронные конфигурации ионов центрального атома и природа лигандов.
27. Сформулируйте критерии существования химической частицы, как единого целого.

20.1.2. Контрольная работа № 1

Билет №1

1. Молекулярная орбиталь – это: а) область пространства, в которой электрон проводит более 90% времени; б) одноэлектронная волновая функция, получаемая при решении уравнений Хартри-Фока; в) область пространства, в которой вероятность нахождения электрона равна 95%; г) полная электронная волновая функция молекулы.
2. МО молекулы водорода имеют вид: $(1=c((1 + (2)), (2=c((1 - (2))$.. Одну из них называют четной, другую - нечетной. Изобразите их и объясните, какое свойство орбиталей лежит в основе такой классификации.
3. Сформулируйте основные условия для интерференции АО с образованием МО. Образуются ли МО в случае перекрывания следующих АО: p_z и p_z ; dxz и s . Приведите рисунок, поясняющий ответ. Назовите эти орбитали, используя основные принципы классификации МО.
4. Напишите, чему равен интеграл перекрывания. Расположите орбитали в порядке уменьшения значения интеграла перекрывания. Назовите эти орбитали, используя основные принципы классификации МО.

а б в г д

5. Составьте пробную волновую функцию в приближении ЛКАО для молекулы **CH**, используя валентный базис.
6. Составьте гамильтониан для молекулы **BeC**.
7. Составьте схемы МО и напишите электронные конфигурации молекулы **B₂** и ионов **B₂⁺** и **B₂⁻**.
8. Определите термы, сравните энергии диссоциации и магнитные моменты вышеуказанных частиц.
9. Составьте схему МО и напишите электронную конфигурацию и терм основного состояния молекулы **VH**.
10. Сформулируйте принцип изоэлектронности. Используя его, напишите электронную конфигурацию и терм молекулярного иона **BeC**.

Контрольная работа № 2

Билет №1

1. Для молекулы H_3 возможны геометрические конфигурации: линейная $D_{\infty h}$ и угловая C_{2v} . Определите типы симметрии МО, образованных из $1s$ -АО, и соответствующих уровней энергии. Определите электронную конфигурацию молекул. Сравните устойчивость и реакционную способность молекул. Примите во внимание, что $E(\sigma_g) < E(a_1)$
2. Составьте СМО для молекулы AlH_2
3. Дайте определение ЛМО, изложите алгоритм их получения
4. Составьте схему МО для молекулы группы симметрии D_{3h} . Последовательность уровней: $1a'_1 < 2a'_1 < 1e' < 1a''_2 < 3a'_1 < 2e' \dots$. Напишите ЭК молекулы CH_3 ,
5. Определите молекулярный терм молекулы, отвечающий следующей электронной конфигурации: группа C_{2v} , $a_1^2 b_1^1 b_2^1$
6. Составьте схему МО для комплекса группы симметрии D_{3h} . Напишите ЭК для комплексного иона $[\text{Cu}(\text{CN})_3]^{2-}$ $[\text{HgI}_3]$
7. Опираясь на ТКП, рассчитайте ЭСПЛ, оцените магнитные свойства и предскажите возможные искажения геометрической конфигурации для $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ (O_h), $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$ (T_d)

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в формах устного опроса (фронтальная беседа) и письменных работ (выполнение практико-ориентированных заданий и одна контрольная работа).

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Полное соответствие ответа обучающегося всем перечисленным критериям. Продемонстрировано знание фундаментальных основ строения и симметрии молекул, умение использовать законы квантовой механики к описанию электронного строения молекулярных систем различной сложности, владение основными навыками интерпретации выводов квантово-механического описания строения химических систем, раскрытия связей между их электронным строением и физическими свойствами, реакционной способностью.	<i>Повышенный уровень</i>	<i>Отлично</i>
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует одному из перечисленных показателей, но обучающийся дает правильные ответы на дополнительные вопросы	<i>Базовый уровень</i>	<i>Хорошо</i>
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует двум из перечисленных показателей, обучающийся дает неполные ответы на дополнительные вопросы.	<i>Пороговый уровень</i>	<i>Удовлетворительно</i>
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует перечисленным показателям. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания теории, допускает грубые ошибки при трактовке практических задач	–	<i>Неудовлетворительно</i>

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

20.2.1 Перечень вопросов к экзамену:

1. Электронное волновое уравнение Шредингера для атомов и молекул. Оператор Гамильтона для атомных и молекулярных систем (на простых примерах). Поверхность электронной энергии. Критерий устойчивости химических частиц в квантовой теории.
2. Метод молекулярных орбиталей. Основные положения. Аналогия с теорией многоэлектронного атома.
3. Описание молекулярных орбиталей в методе МО ЛКАО. Наиболее распространенные типы базисов. Базисные атомные орбитали.
4. Молекулярный ион водорода H_2^+ . Приближение МО ЛКАО: выбор базисных функций, построение вековых уравнений, нахождение энергий МО.
5. Молекулярный ион водорода H_2^+ . Приближение МО ЛКАО: интегралы перекрывания, обменный и кулоновский.
6. Молекулярный ион водорода H_2^+ . Приближение МО ЛКАО: расчет волновых функций
7. Классификация МО двухатомных гомоядерных молекул. Основные принципы построения схем МО. Термы.
8. Гетероядерные двухатомные молекулы в методе МО ЛКАО (на примере HF , LiH , CO). Основные принципы классификации. Термы.
9. Связь свойств двухатомных молекул (энергия диссоциации, межядерное расстояние и т.д.) с их электронным строением на примере элементов II периода.
10. Элементы и операции симметрии. Теоремы взаимодействия элементов симметрии.
11. Точечные группы симметрии молекул. Номенклатура Шенфлиса. Методика определения групп симметрии.
12. Построение симметризованных молекулярных орбиталей (молекула BeH_2).
13. Понятие геометрической конфигурации молекулы. Геометрические параметры. Основные идеи метода отталкивания электронных пар валентной оболочки. Предсказание равновесной геометрической конфигурации.
14. Понятие геометрической конфигурации молекулы. Геометрические параметры. Предсказание равновесной геометрической конфигурации в методе МО ЛКАО.
15. Метод Хюккеля для описания сопряженных органических соединений (этилен)
16. Метод Хюккеля для описания сопряженных органических соединений с гетероатомом (формальдегид)
17. Сопряженные ароматические соединения. Метод Фроста.
18. Сопряженные ароматические соединения. Ароматичность и антиароматичность.
19. Примеры полуэмпирических расчетов свойств молекул: электронная плотность, заряд, порядок связи, индекс свободной валентности.
20. Примеры полуэмпирических расчетов свойств молекул (оценка потенциалов ионизации, энергии молекулы, энергии локализации и делокализации, на примере молекулы аллила).
21. Сопряженные моноциклические соединения. Метод Фроста.
22. Альтернантные углеводороды.
23. Примеры полуэмпирических расчетов свойств молекул: электронная плотность, заряд, порядок связи, индекс свободной валентности.
24. Реакционная способность химических соединений. Приближения изолированной и реагирующей молекулы.
25. Качественный анализ возможных механизмов химических реакций. Индексы реакционной способности.
26. Качественный анализ возможных механизмов химических реакций. Теория граничных орбиталей Фукуи.

Описание технологии проведения

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования. Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и практические задания, позволяющие оценить степень сформированности умений и навыков. При оценивании используются количественная шкала оценок. Критерии оценивания приведены выше.

При реализации дисциплины с применением дистанционных образовательных технологий оценка за зачет/экзамен может быть выставлена по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре.

20.2.2 Перечень заданий для проверки сформированности компетенций:

ОПК-1 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности:

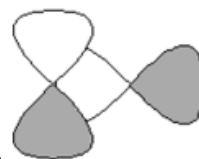
1. Молекулярная орбиталь – это:
 1. Полная электронная волновая функция молекулы;
 2. Область пространства, в которой вероятность нахождения электрона равна 95%;
 3. Одноэлектронная волновая функция, получаемая при решении уравнения Шредингера для молекулы;
 4. Область пространства, в которой электрон проводит более 90% времени.
2. Определите, чему равен интеграл перекрывания орбиталей .



1. Равен нулю
2. Больше нуля
- 3.. Меньше нуля
4. Равен единице

3. Определите, чему равен интеграл перекрывания орбиталей .

1. Равен нулю
2. Больше нуля
- 3.. Меньше нуля
4. Равен единице



4. Определите, чему равен интеграл перекрывания орбиталей .

1. Равен нулю
2. Больше нуля
- 3.. Меньше нуля
4. Равен единице



5. Молекулярная орбиталь σ (сигма) – это
 1. Орбиталь, симметричная относительно оси, проходящей через линию связи
 2. Орбиталь, антисимметричная относительно оси, проходящей через линию связи

3. Орбиталь, симметричная относительно плоскости, перпендикулярной оси молекулы

4. Орбиталь, антисимметричная относительно плоскости, проходящей через линию связи

6. Молекулярная орбиталь π (пи) – это

1. Орбиталь, симметричная относительно оси, проходящей через линию связи

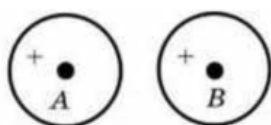
2. Орбиталь, антисимметричная относительно оси, проходящей через линию связи

3. Орбиталь, симметричная относительно узловой плоскости, проходящей через линию связи

оси молекулы

4. Орбиталь, антисимметричная относительно узловой плоскости, проходящей через линию связи

7. Назовите молекулярную орбиталь, используя основные принципы классификации

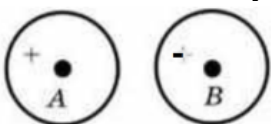


s-s

МО.

1. σ (сигма), связывающая
2. σ (сигма), разрыхляющая
3. π (пи), связывающая
4. π (пи), разрыхляющая

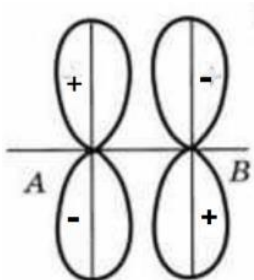
8. Назовите молекулярную орбиталь, используя основные принципы классификации



МО.

1. σ (сигма), связывающая
2. σ (сигма), разрыхляющая
3. π (пи), связывающая
4. π (пи), разрыхляющая

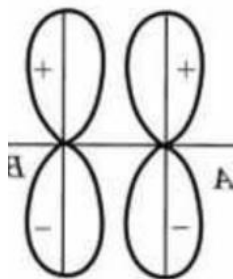
9. Назовите молекулярную орбиталь, используя основные принципы классификации



МО

1. σ (сигма), связывающая
2. σ (сигма), разрыхляющая
3. π (пи), связывающая
4. π (пи), разрыхляющая

10. Назовите молекулярную орбиталь, используя основные принципы классификации



МО.

1. σ (сигма), связывающая
2. σ (сигма), разрыхляющая
3. π (пи), связывающая
4. π (пи), разрыхляющая

11. Основные условия для образования молекулярных орбиталей из атомных::

1. Атомные орбитали должны иметь близкие значения энергии, одинаковую симметрию относительно оси перекрывания
2. Атомные орбитали должны иметь близкие значения энергии, одинаковую симметрию относительно плоскости, перпендикулярной оси молекулы
3. Атомные орбитали должны иметь сильно различающиеся значения энергии, одинаковую симметрию относительно оси перекрывания
4. Атомные орбитали должны иметь сильно различающиеся значения энергии, одинаковую симметрию относительно оси перекрывания

12. Пробная волновая функция в валентном базисе для молекулы водорода в методе МО ЛКАО имеет вид:

1. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2$;
2. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2 + C_3(2S)_3 + C_4(2S)_4$;
3. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2 + C_3(2S)_1 + C_4(2S)_2 + C_5(2p_z)_1 + C_6(2p_z)_2 + C_7(2p_x)_1 + C_8(2p_x)_2 + C_9(2p_y)_1 + C_{10}(2p_y)_2$
4. $\Psi = C_1(2S)_1 + C_2(2S)_2 + C_3(2p_z)_1 + C_4(2p_z)_2 + C_5(2p_x)_1 + C_6(2p_x)_2 + C_7(2p_y)_1 + C_8(2p_y)_2$

13. Пробная волновая функция в минимальном базисе для молекулы водорода в методе МО ЛКАО имеет вид:

1. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2$;
2. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2 + C_3(2S)_3 + C_4(2S)_4$;
3. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2 + C_3(2S)_1 + C_4(2S)_2 + C_5(2p_z)_1 + C_6(2p_z)_2 + C_7(2p_x)_1 + C_8(2p_x)_2 + C_9(2p_y)_1 + C_{10}(2p_y)_2$
4. $\Psi = C_1(2S)_1 + C_2(2S)_2 + C_3(2p_z)_1 + C_4(2p_z)_2 + C_5(2p_x)_1 + C_6(2p_x)_2 + C_7(2p_y)_1 + C_8(2p_y)_2$

14. Пробная волновая функция в приближении Хюккеля для молекулы этилена имеет вид:

1. $\Psi = C_1(2p_x)_1 + C_2(2p_x)_2$;
2. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2$;
3. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2 + C_3(2S)_1 + C_4(2S)_2 + C_5(2p_z)_1 + C_6(2p_z)_2 + C_7(2p_x)_1 + C_8(2p_x)_2 + C_9(2p_y)_1 + C_{10}(2p_y)_2$
4. $\Psi = C_1(1S)_1 + C_2(1S)_2 + C_3(2S)_3 + C_4(2S)_4$

15. Основные признаки образования связывающей молекулярной орбитали:

1. Увеличение электронной плотности в пространстве между ядрами, понижение энергии МО относительно исходных атомных орбиталей
2. Уменьшение электронной плотности в пространстве между ядрами, понижение энергии МО относительно исходных атомных орбиталей
3. Увеличение электронной плотности в пространстве между ядрами, повышение энергии МО относительно исходных атомных орбиталей

4. Уменьшение электронной плотности в пространстве между ядрами, повышение энергии МО относительно исходных атомных орбиталей

16. Основные признаки образования разрыхляющей молекулярной орбитали:

1. Увеличение электронной плотности в пространстве между ядрами, понижение энергии МО относительно исходных атомных орбиталей

2. Уменьшение электронной плотности в пространстве между ядрами, понижение энергии МО относительно исходных атомных орбиталей

3. Увеличение электронной плотности в пространстве между ядрами, повышение энергии МО относительно исходных атомных орбиталей

4. Уменьшение электронной плотности в пространстве между ядрами, повышение энергии МО относительно исходных атомных орбиталей

17. Различаются ли по энергии сигма- и пи-связи?

1. нет, одинаковы по энергии

2. да, пи-связи прочнее

3. да, сигма-связи прочнее

18. Интеграл перекрывания атомных орбиталей при образовании связывающих молекулярных орбиталей равен

1. нулю

2. единице

3. больше нуля

4. меньше нуля

19. Интеграл перекрывания атомных орбиталей при образовании разрыхляющих молекулярных орбиталей равен

1. нулю

2. единице

3. больше нуля

4. меньше нуля

20. Число σ -связей в молекуле этилена $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ равно

1. нет σ -связей

2. 1

3. 5

4. 3

Ключи к тесту ОПК-1

Вопросы	1	2	3	4	5	6	7	8
Ответы	3	2	1	3	1	4	1	2
Вопросы	9	10	11	12	13	14	15	16
Ответы	4	3	1	1	1	1	1	4
Вопросы	17	18	19	20	21	22	23	24
Ответы	3	3	4	5				

**Перечень заданий для проверки сформированности компетенции: ОПК-3
Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.**

1..Выберите выражение для расчета кратности связи (**K**) в двухатомной молекуле, где **n** - число электронов на связывающих молекулярных орбиталях, **n*** - число электронов на разрыхляющих орбиталях

1. $K = n - n^*$
2. $K = \frac{n - n^*}{2}$
3. $K = \frac{n + n^*}{2}$
4. $K = \frac{n^* - n}{2}$

2.Как коррелируют между собой величины кратности связи в двухатомной молекуле и энергии её диссоциации:

1. Чем больше кратность связи, тем больше энергия диссоциации молекулы
2. Чем больше кратность связи, тем меньше энергия диссоциации молекулы
3. Нет взаимосвязи

3.Как коррелируют между собой величины кратности связи в двухатомной молекуле и межъядерного расстояния (длины связей)

1. Чем больше кратность связи, тем больше межъядерное расстояние
2. Чем больше кратность связи, тем меньше межъядерное расстояние
3. Нет взаимосвязи

4. Приведены электронные конфигурации валентной оболочки молекулы азота и его катиона: **N₂ π⁴3σ²; N₂⁺: π⁴3σ¹**. Рассчитайте кратности связи. Сравните их энергии диссоциации.

1. энергия диссоциации молекулы больше, чем иона, так как кратность связи молекулы (K=3) больше кратности связи иона (K=2,5)
2. энергия диссоциации молекулы меньше, чем иона, так как кратность связи молекулы (K=3) больше кратности связи иона (K=2,5)
- 3.. энергия диссоциации молекулы меньше, так как кратность связи молекулы (K=2,5) меньше кратности связи иона (K=3)
4. энергия диссоциации не зависит от кратности связи

5. Приведены электронные конфигурации валентной оболочки молекулы азота и его аниона: **N₂ 1π⁴1σ²; N₂⁻: 1π⁴1σ²2π^{*1}**. Рассчитайте кратности связи. Сравните их энергии диссоциации.

1. энергия диссоциации молекулы больше, чем иона, так как кратность связи молекулы (K=3) больше кратности связи иона (K=2,5)
2. энергия диссоциации молекулы меньше, чем иона, так как кратность связи молекулы (K=3) больше кратности связи иона (K=2,5)
- 3.. энергия диссоциации молекулы меньше, так как кратность связи молекулы (K=2,5) меньше кратности связи иона (K=3)
4. энергия диссоциации не зависит от кратности связи

6.Приведены электронные конфигурации валентной оболочки молекулы азота и его катиона: **N₂ π⁴3σ²; N₂⁺: 1π⁴1σ¹**. Рассчитайте кратности связи. Сравните их длины связей (межъядерные расстояния)

1. Длина связи в молекуле больше, чем в ионе, так как кратность связи молекулы (K=3) больше кратности связи иона (K=2,5)
2. Длина связи в молекуле меньше, чем в ионе, так как кратность связи молекулы (K=3) больше кратности связи иона (K=2,5)

3.. Длина связи в молекуле меньше, так как кратность связи молекулы ($K=2,5$) меньше кратности связи иона ($K=3$)

4. Длина связи не зависит от кратности связи

7.. Приведены электронные конфигурации валентной оболочки молекулы азота и его аниона: N_2 $1\pi^4 1\sigma^2$; N_2^- : $1\pi^4 1\sigma^2 2\pi^{*1}$. Рассчитайте кратности связи. Сравните их длины связей (межъядерные расстояния)

1. Длина связи в молекуле больше, чем в ионе, так как кратность связи молекулы ($K=3$) больше кратности связи иона ($K=2,5$)

2. Длина связи в молекуле меньше, чем в ионе, так как кратность связи молекулы ($K=3$) больше кратности связи иона ($K=2,5$)

3.. Длина связи в молекуле меньше, так как кратность связи молекулы ($K=2,5$) меньше кратности связи иона ($K=3$)

4. Длина связи не зависит от кратности связи

8. . Зная электронную конфигурацию валентной оболочки молекулы и ионов : N_2 $\pi^4 3\sigma^2$; N_2^+ : $1\pi^4 2\sigma^1$; N_2^- : $1\pi^4 1\sigma^2 2\pi^{*1}$ · определите, какие из частиц обладают магнитными свойствами:

1. N_2 , 2. N_2^+ , 3. N_2^-

9. Зная электронную конфигурацию валентной оболочки молекулы O_2 : $1\sigma^2 1\pi^4 2\pi^{*2}$ запишите электронную конфигурацию ионов:

1. O_2^{-2} $1\sigma^2 1\pi^4 2\pi^{*4}$ O_2^{+2} . $1\sigma^2 1\pi^4$

2. O_2^{-2} $1\sigma^2 1\pi^4$ O_2^{+2} . $1\sigma^2 1\pi^4 2\pi^{*4}$

3. O_2^{-2} $1\sigma^2 1\pi^4 2\pi^{*3}$ O_2^{+2} . $1\sigma^2 1\pi^4 2\pi^{*1}$

10. Опираясь на правила Фукуи, определите направление электрофильной атаки в молекуле, если известно, что высшая заполненная МО имеет вид:

$$\Psi = 0,8285\phi_1 + 0,2398\phi_2 - 0,5061\phi_3 - 0,2398\phi_4.$$

1. первый атом углерода, 2. второй атом, 3. третий атом, 4. четвертый атом.

11. Опираясь на правила Фукуи, определите направление нуклеофильной атаки в молекуле, если известно, что низшая свободная МО имеет вид: $\psi = 0,4886\phi_1 - 0,7511\phi_2 + 0,4440\phi_3 - 0,2398\phi_4$:

1. первый атом углерода, 2. второй атом, 3. третий атом, 4. четвертый атом.

12. Какие структуры пятичленного кольца C_5H_5 , $C_5H_5^+$, $C_5H_5^-$ будут обладать ароматическими свойствами:

1. C_5H_5 , так как имеет неспаренный электрон,

2. $C_5H_5^+$, так как имеет четное число электронов на связывающих орбиталях,

3. $C_5H_5^-$, так как имеет полностью заполненные связывающие орбитали и отсутствуют электроны на разрыхляющих орбиталях.

13. Какие структуры трехчленного кольца C_3H_3 , $C_3H_3^+$, $C_3H_3^-$ будут обладать ароматическими свойствами:

1. C_3H_3 , так как имеет неспаренный электрон,

2. $C_3H_3^-$, так как имеет четное число электронов,

3. $C_3H_3^+$, так как имеет полностью заполненные связывающие орбитали и отсутствуют электроны на разрыхляющих орбиталях.

14. Какие структуры шестичленного кольца C_6H_6 , $C_6H_6^+$, $C_6H_6^-$ будут обладать ароматическими свойствами:

1. C_6H_6 , так как имеет полностью заполненные связывающие орбитали и отсутствуют электроны на разрыхляющих орбиталях,

2. $C_6H_6^+$, так как все электроны на связывающих орбиталях,

3. $C_6H_6^-$, так как имеет наибольшее число электронов.

15. В приближении изолированной молекулы как можно определить направление радикальной атаки в молекуле с сопряженными π -связями :

1. в то положение, где наибольшее значение индекса свободной валентности,
2. в то положение, где наименьшее значение индекса свободной валентности,
3. нельзя определить.

16. В приближении изолированной молекулы как можно определить направление электрофильной атаки в молекуле с сопряженными π -связями :

1. в то положение, где наибольшее значение электронной плотности,
2. в то положение, где наименьшее значение электронной плотности,
3. нельзя определить

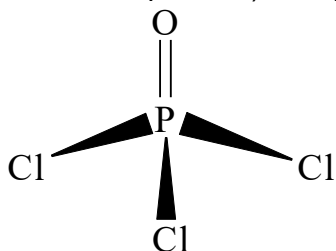
17. В приближении изолированной молекулы как можно определить направление нуклеофильной атаки в молекуле с сопряженными π -связями :

1. в то положение, где наибольшее значение электронной плотности,
2. в то положение, где наименьшее значение электронной плотности,
3. нельзя определить

18. Чем отличаются пространственные группы симметрии кристаллов от точечных групп симметрии молекул:

1. наличием операции трансляции;
2. отсутствием операции трансляции;
3. ничем не отличаются

19. Установите элементы симметрии, характерные для молекулы POCl_3 (треугольная пирамида) и определите точечную группу симметрии:



1. C_{3v} ($E, C_3, 3 \sigma_v$)
2. C_{2v} ($E, C_2, 2 \sigma_v$)
3. D_{3h} ($E, C_3, \sigma_h, 3C_2 \perp C_3$)
4. C_{2h} (E, C_2, σ_h)

20. Для молекулы методом МО ЛКАО было рассчитано несколько значений электронной энергии в атомных единицах (а.е.). Какое из них соответствует основному состоянию молекулы:

1. $-1,3$ а.е.;
2. $-2,4$ а.е.;
3. $-0,8$ а.е.;
4. -2 а.е.

Ключи к тесту ОПК-3

Вопросы	1	2	3	4	5	6	7	8
Ответы	2	1	2	1	1	2	2	2,3
Вопросы	9	10	11	12	13	14	15	16
Ответы	1	1	2	3	3	1	1	1
Вопросы	17	18	19	20	21	22	23	24
Ответы	2	1	1	2				