

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
физической химии

Козадеров О.А.
10.04.2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.О.20 Строение вещества

- 1. Код и наименование специальности:** 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
- 2. Специализация:** Фундаментальная химия в профессиональном образовании
- 3. Квалификация выпускника:** Химик. Преподаватель химии
- 4. Форма обучения:** Очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** 1004 физической химии
- 6. Составители программы:** Соцкая Надежда Васильевна, к.х.н., доцент
- 7. Рекомендована:** НМС химического факультета от 27.03.2025, протокол № 10-03
- 8. Учебный год:** 2027 / 2028 **Семестр(ы):** 6

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целями освоения учебной дисциплины являются:

- формирование компетенций обучающегося в области фундаментальных представлений о строении вещества на субатомном, атомном, молекулярном уровнях, а также на уровне макроскопических тел (полимеры, кристаллы), а также установления взаимосвязи между строением веществ и их физико-химическими свойствами на основе законов квантовой механики, термодинамики и симметрии.

Задачи учебной дисциплины:

- сформировать представления о различных уровнях организации материи – от элементарных частиц до макроскопических тел;

- ознакомиться с приложением законов квантовой механики к молекулярным системам различной степени сложности;

- приобрести навыки 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;

- раскрыть связи между электронным строением химических соединений и их физическими свойствами;

- раскрыть связи между электронным строением химических соединений и их реакционной способностью.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Обязательная часть Блока 1. Дисциплины (модули).

Для освоения этой части цикла студент должен иметь базовые знания фундаментальных разделов физики и химии, (прежде всего физической, неорганической, органической, химии, квантовой механики и квантовой химии); уметь применять основные законы химии, физики, квантовой механики при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных.

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: алгоритмы анализа результатов эксперимента и теоретических исследований на основе естественнонаучных законов и закономерностей развития химической науки. Уметь: применять знания для выбора метода изучения строения молекул и конденсированного вещества; интерпретировать результаты физических измерений и проявление химических свойств к строению молекул веществ; сопоставлять данные физических измерений со свойствами и структурой органических и неорганических веществ. Владеть: навыками критического анализа результатов эксперимента и теоретических расчетов свойств веществ и материалов.
		ОПК-1.2	Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ	Знать: теоретические основы традиционных и новых разделов современной химии. Уметь: интерпретировать результаты собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ. Владеть: методиками интерпретирования

			с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	результатов экспериментов и расчётно-теоретических работ.
		ОПК-1.3	Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчётно-теоретических работ химической направленности	Знать: основные принципы формирования научных выводов (тезис, обоснование, следствие). Уметь: обобщать данные из разных источников, сопоставлять результаты собственных экспериментов и расчётно-теоретических работ, выявлять противоречия Владеть: методиками интерпретирования результатов экспериментов и расчётно-теоретических работ
ОПК-3	Способен применять расчётно-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: основы квантовой химии, термодинамики, кинетики, а также особенности полуэмпирических методов. Уметь: Применять модели для расчетов, интерпретировать результаты, выбирать подходящую модель для задачи. Владеть: Навыками комплексного анализа химических систем с использованием моделей
		ОПК-3.2	Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности традиционных и новых разделов в химии	Знать: основы информационных технологий, основные возможности и правила работы со стандартными программными продуктами при решении профессиональных задач. Уметь: применять стандартное программное обеспечение при решении химических задач с учётом основных требований информационной безопасности. Владеть: базовыми навыками применения стандартного программного обеспечения для обработки результатов наблюдений.

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

Форма промежуточной аттестации экзамен

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость		
		Всего	По семестрам	
			№ семестра 6	№ семестра
Аудиторные занятия		72	72	...
в том числе:	лекции	36	36	
	практические	-	-	
	лабораторные	36	36	
Самостоятельная работа		36	36	
в том числе: курсовая работа (проект)				
Форма промежуточной аттестации (экзамен - 36 часов)		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. 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.	ЭУМК https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2217
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	
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.	
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 Упрощение вековых уравнений методом теории групп. Групповые орбитали молекул. Правила построения молекулярных орбиталей, удовлетворяющих требованиям симметрии.	
1.5	Электронное строение некоторых молекул	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. Концепция гибридизации в методах валентных	

		связей и молекулярных орбиталей. Делокализованные (канонические) и локализованные орбитали. Обоснование валентного штриха. 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. Небензoidные ароматические соединения. Правила $4n$ и $4n+2$. Современные представления об ароматичности. Антиароматичность. Альтернантные углеводороды.	
1.6	Сохранение орбитальной симметрии в химических реакциях	Качественная теория реакционной способности органических соединений. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной и анионной делокализации. 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.	
2. Лабораторные занятия			
2.1	Квантово-механическая интерпретация основных представлений теории химического строения молекул	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 молекулярного иона водорода по методу МО ЛКАО.	
2.2	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 перекрывание, для вывода правил отбора для спектральных переходов, для расчета терма молекулы).	
2.3	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.	
2.4	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)	

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
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:

Студенты знакомятся с теоретическим материалом в процессе лекционного курса, самостоятельно прорабатывая его с использованием рекомендованной учебной литературы и учебно-методических пособий (п. 15). Лабораторные занятия проводятся с целью проработки теоретических основ и обучения методам проведения расчетов характеристик молекул и выполнения конкретных расчетов.

Текущая аттестация обеспечивает проверку освоения учебного материала, приобретения знаний, умений и навыков в процессе аудиторной и самостоятельной работы студентов (ОПК-1 и ОПК-3). Она включает регулярные отчеты по лабораторным работам, выполнение тестовых и иных заданий к лекциям. При подготовке к текущей аттестации студенты изучают рекомендованную преподавателем литературу по темам лекционных и лабораторных занятий, самостоятельно осваивают понятийный аппарат и закрепляют теоретические знания. Планирование и организация текущих аттестаций знаний, умений и навыков осуществляется в соответствии с содержанием рабочей программы и календарно- тематическим планом с применением фонда оценочных средств. Текущая аттестация является обязательной, ее результаты оцениваются в балльной системе и могут быть учтены при промежуточной аттестации обучающихся.

Обучение лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом их индивидуальных психофизических особенностей. Для лиц с нарушением слуха информация по учебной дисциплине предоставляется на бумажном или электронном носителе, допускается присутствие ассистентов и сурдопереводчиков на занятиях. Промежуточная аттестация для таких студентов проводится в письменной форме с общими критериями оценивания; при необходимости время подготовки на экзамене может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации с использованием программ-синтезаторов речи, а также использование звукозаписывающих устройств на лекциях. На занятиях также может присутствовать ассистент. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование; время подготовки на экзамене может быть увеличено.

Студенты с нарушениями опорно-двигательного аппарата могут проходить часть занятий дистанционно. Промежуточная аттестация для них проводится на общих основаниях, при необходимости процедура экзамена может быть реализована дистанционно.

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.
4.	Цирельсон, В. Г. Квантовая химия : молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие / В. Г. Цирельсон. – 5-е изд. – Москва : Лаборатория знаний, 2021. – 522 с. : ил., табл., схем., граф. – (Учебник для высшей школы). – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=712979 (дата обращения: 08.06.2025). – Библиогр.: с. 485-487. – ISBN 978-5-93208-518-9.
5.	Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко ; Национальная академия наук Беларуси, Институт биоорганической химии. – Минск : Белорусская наука, 2023. – 139 с. : ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=707954 (дата обращения: 07.05.2025). – Библиогр. в кн. – ISBN 978-985-08-2970-2. – Текст : электронный.

б) дополнительная литература:

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

12.	Бердетт Дж. Химическая связь./ Дж. Бердетт. – М.: Мир: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 245 с.
-----	--

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
1.	Зональная научная библиотека www.lib.vsu.ru
2.	Интернет портал для химиков http://www.chemweb.com
6.	Интернет-ресурсы - библиотека http://www.twirpx.com
4.	Портал научно-технической информации ЭБ Нефть и Газ 2007 www.nglib.ru
5.	Интернет портал образовательных ресурсов http://window.edu.ru
6.	ЭУМК «Строение вещества 3 к» https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=2217

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ 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.
2	Симкин Б.Я. Задачи по теории строения молекул / Б.Я. Симкин, М.Е. Клецкий, М.Н. Глуховцев. – Ростов-н/Д: Феникс, 1997. – 272 с.

17. Образовательные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии:

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:

Учебная аудитория (ауд. 439): доска магнитная меловая мультимедиа-проектор, ноутбук, проектор, экран для проектора WinPro 8, Office Standard 2019, Kaspersky Endpoint Security, Google Chrome, Mozilla Firefox
Учебная аудитория кафедры физической химии (167): Учебная мебель, проектор Epson, экран для проектора настенный, таблица Менделеева.
Помещение для самостоятельной работы обучающихся, компьютерный класс (ауд. 271): специализированная мебель, компьютеры с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ВГУ WinPro 8, OfficeSTD, Kaspersky Endpoint Security, Google Chrome

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 строения	ОПК-1	ОПК-1.1-1.3 ОПК-3.2	Практическое задание
3	Квантово-механическая интерпретация основных представлений теории	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.3 ОПК-3.1	Контрольная работа

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

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

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: практических заданий и контрольных работ

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 ионов.
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.

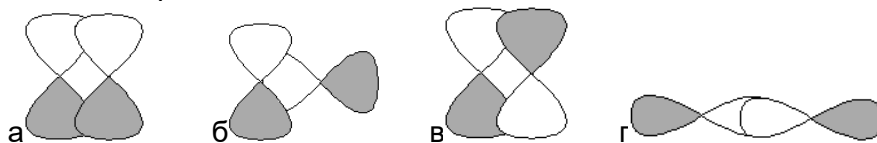
18. Поясните принцип составления групповых орбиталей (ГО) в методе МО.
19. Поясните принцип составления симметризованных орбиталей.
20. Объясните смысл терминов делокализованные и локализованные молекулярные орбитали в методе МО.
21. Составьте волновые функции для молекул этилена и бутадиена в приближении 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 Примеры контрольных работ

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: $\Psi_1 = c(\varphi_1 + \varphi_2)$, $\Psi_2 = c(\varphi_1 - \varphi_2)$. 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 перекрытия следующих АО: p_z и p_z ; d_{xz} и s . Приведите рисунок, поясняющий ответ. Назовите эти орбитали, используя основные принципы классификации МО.
4. Напишите, чему равен интеграл перекрытия. Расположите орбитали в порядке уменьшения значения интеграла перекрытия. Назовите эти орбитали, используя основные принципы классификации МО.



5. Составьте пробную волновую функцию в приближении ЛКАО для молекулы CH_4 , используя валентный базис.
6. Составьте гамильтониан для молекулы BeC .
7. Составьте схемы МО и напишите электронные конфигурации молекулы B_2 и ионов B_2^+ и B_2^- .
8. Определите термы, сравните энергии диссоциации и магнитные моменты вышеуказанных частиц.
9. Составьте схему МО и напишите электронную конфигурацию и терм основного состояния молекулы BH .
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: $1a'_1 < 2a'_1 < 1e' < 1a''_2 < 3a'_1 < 2e'$... 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)

20.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: перечня вопросов к экзамену, КИМ

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.

Пример билета (КИМ):

Направление подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия Дисциплина Строение вещества Форма обучения очная Вид контроля экзамен Контрольно измерительный материал № 2 1. Молекулярный ион водорода H_2^+. Приближение МО ЛКАО: расчет волновых функций. 2. Реакционная способность химических соединений. Приближения изолированной и реагирующей молекулы. Преподаватель _____ подпись	УТВЕРЖДАЮ: Заведующий кафедрой физической химии д.х.н., доц. _____ О.А. Козадеров _____ .20__
--	--

Описание технологии проведения

Промежуточная аттестация студентов является основной формой контроля аудиторной работы студентов и проводится с целью установления уровня и качества подготовки студентов ФГОС 3++ и определяет:

- полноту и прочность теоретических знаний;
- сформированность умений применять теоретические знания при решении практических и профессиональных задач;
- сформированность общих и профессиональных компетенций.

Подготовка к промежуточной аттестации является формой самостоятельной работы студентов. При этом обучающийся должен использовать рекомендованный рабочей программой перечень основной и дополнительной литературы, материалы лекций, информационные и электронно-образовательные ресурсы. Для подготовки к промежуточной аттестации студент также может использовать перечень вопросов, вынесенных на экзамен, позволяющий оценить уровень сформированности профессиональных компетенций по дисциплине «Общая химическая технология и промышленная экология».

Промежуточная аттестация проводится в устной (или письменной) форме. Преподаватель, проводящий промежуточную аттестацию, имеет право задавать студентам дополнительные вопросы по всему разделу программы учебной дисциплины. Время проведения экзамена устанавливается нормами времени. Результат сдачи промежуточной аттестации заносится преподавателем в зачетно-экзаменационную ведомость и зачетную книжку.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

Оценка результатов обучения на промежуточной аттестации происходит по следующим показателям:

- 1) знание учебного материала и владение понятийным аппаратом курса Строение вещества
- 2) умение связывать теорию с практикой на основе результатов, полученных при выполнении расчетных работ;

- 3) умение иллюстрировать ответ примерами;

По результатам всех выполненных заданий текущего контроля студентам может быть выставлен зачет автоматом.

По результатам всех выполненных заданий текущего контроля студентам может быть выставлен экзамен автоматом:

средняя оценка 3-3,5 – «удовлетворительно»,

3,6-4,5 – «хорошо»,

4,5-5 – «отлично».

Для оценивания результатов обучения на экзамене используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

<i>Критерии оценивания компетенций</i>	<i>Шкала оценок</i>
<i>Полный, исчерпывающий ответ, демонстрирующий глубокое понимание предмета и широкую эрудицию в оцениваемой области. Критический, оригинальный подход к выбору материала при подготовке к промежуточной аттестации.</i>	<i>Отлично</i>
<i>Ответ стандартный, в целом качественный, основан на использовании основных источников информации. Присутствуют незначительные пробелы в знаниях или несущественные ошибки.</i>	<i>Хорошо</i>
<i>Ответ неполный, основан исключительно на использовании лекционных материалов. При понимании сущности предмета в целом имеются существенные пробелы в знаниях.</i>	<i>Удовлетворительно</i>
<i>Неспособность ответить на вопрос без помощи экзаменатора. Незнание значительной части принципиально важных элементов дисциплины. Присутствуют многочисленные грубые ошибки.</i>	<i>Неудовлетворительно</i>

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.

20.3. Фонды оценочных средств для проведения диагностических работ с целью оценки остаточных знаний по результатам освоения дисциплины

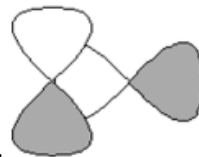
ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

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.. Менее нуля
4. Равен единице



3. Определите, чему равен интеграл перекрывания орбиталей .

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



4. Определите, чему равен интеграл перекрывания орбиталей .

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

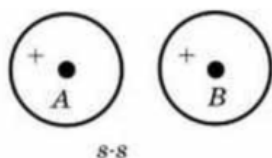
5. Молекулярная орбиталь σ (сигма) – это

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

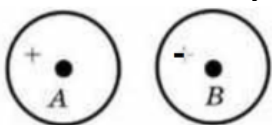
1. Орбиталь, симметричная относительно оси, проходящей через линию связи
2. Орбиталь, антисимметричная относительно оси, проходящей через линию связи
3. Орбиталь, симметричная относительно узловой плоскости, проходящей через линию связи
4. Орбиталь, антисимметричная относительно узловой плоскости, проходящей через линию связи

7. Назовите молекулярную орбиталь, используя основные принципы классификации МО.



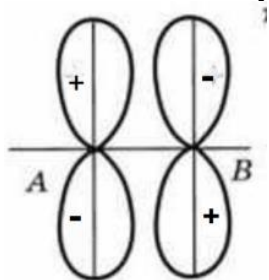
1. σ (сигма), связывающая
2. σ (сигма), разрыхляющая
3. π (пи), связывающая
4. π (пи), разрыхляющая

8. Назовите молекулярную орбиталь, используя основные принципы классификации МО.



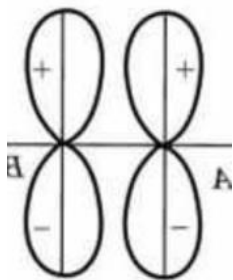
1. σ (сигма), связывающая
2. σ (сигма), разрыхляющая
3. π (пи), связывающая
4. π (пи), разрыхляющая

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-3

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				

ОПК-4 Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

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: N_2 $\pi^4 3\sigma^2$; N_2^+ $\pi^4 3\sigma^1$. 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

5. 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 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: N_2 $1\pi^4 3\sigma^2$; N_2^+ : $1\pi^4 1\sigma^1$. 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

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 $1\pi^4 3\sigma^2$; 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

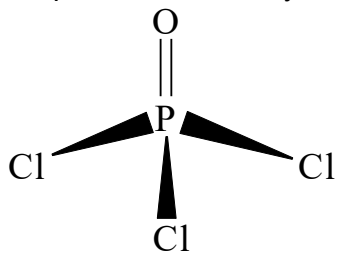
17. В приближении изолированной молекулы как можно определить направление нуклеофильной атаки в молекуле с сопряженными π -связями :

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 σ_v)
2. C_{2v} (E, C_2 , 2 σ_v)
3. D_{3h} (E, C_3 , σ_h , 3 $\text{C}_2 \perp \text{C}_3$)
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 тестам ОПК-4

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				

Критерии и шкалы оценивания:

Для оценивания выполнения заданий используется балльная шкала:

1) закрытые задания (тестовые, средний уровень сложности):

- 1 балл – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ, в том числе частично.

2) открытые задания (тестовые, повышенный уровень сложности):

- 2 балла – указан верный ответ;
- 0 баллов – указан неверный ответ, в том числе частично.

3) открытые задания (мини-кейсы, средний уровень сложности):

- 5 баллов – задание выполнено верно (получен правильный ответ, обоснован (аргументирован) ход выполнения (при необходимости));
- 2 балла – выполнение задания содержит незначительные ошибки, но приведен правильный ход рассуждений, или получен верный ответ, но отсутствует обоснование хода его выполнения (если оно было необходимым), или задание выполнено не полностью, но получены промежуточные (частичные) результаты, отражающие правильность хода выполнения задания, или, в случае если задание состоит из выполнения нескольких подзаданий, 50% которых выполнено верно;

0 баллов – задание не выполнено или выполнено неверно (ход выполнения ошибочен или содержит грубые ошибки, значительно влияющие на дальнейшее его изучение).